

[概要]

これは第一原理分子軌道法（非経験的分子軌道法）と密度汎関数理論のプログラムです。具体的には、Hartree-Fock 理論、2 次の Møller-Plesset 摂動、Kohn-Sham 法が実装されています。

[インストール]

お使いの Windows が 64 ビット版である事を確認してください。32 ビット版では動きません。ご自身の「ドキュメント」フォルダの直下に圧縮ファイル (Zip 形式) を展開してください。Quantum_Chemistry という名のフォルダができて、その下にファイルが配置されます。他の場所に Zip ファイルを展開しても、プログラムの動作にはなんら問題はありません。しかし、その場合はショートカットのアイコンが正しく表示されません。気になる場合はアイコンを再設定してください。右クリックのプロパティで設定できます。アイコン用のファイル（拡張子 .ico）は Gui フォルダの中にあります。Quantum_Chemistry の中のフォルダの名前や相対位置は変更しないでください。変更すると動作しなくなります。

[アンインストール]

フォルダ Quantum_Chemistry を消去します。それで終わりです。レジストリは使ってません。

[使い方]

Run フォルダに移って、ショートカット 01.Quantum をダブルクリックします。小さなウィンドウが開くので、そこで適当な設定をしてから、ウィンドウ下部の Run ボタンをクリックします。計算が始まり、結果やログを書き込むファイル (structure.....) が Run フォルダ内に作られます。計算の経過はウィンドウ内の枠に表示されます。“Completed. Normal termination” で計算完了です。プログラムの終了は Close ボタンをクリックします。

全ての設定項目と選択肢は量子化学の標準的な用語で書かれています。もし解らなければ本を参照してください。また、結果ファイルの内容も普通ですので、直感的に読めるはずです。可視化用の Cube 形式ファイルは、対応しているソフトウェア (Avogadro や Winmostar 等) を使って見る事ができます。MP2 理論を選んだ場合、エネルギーにのみ、2 次の多体摂動による相関が取り入れられます。つまり、分子軌道や電子密度や部分電荷の結果は、Hartree-Fock(HF) 理論における結果です。RPA (Random Phase Approximation) もしくは TDA (Tamm-Dankoff approximation) を選んだ場合、HF 理論による計算 (構造最適化など) の後に、時間依存 HF 法で電子励起状態を計算し、紫外線可視光吸収スペクトルを出力します。

構造最適化は勾配のみを使った近似的共役勾配法を実施します。“Times” は「勾配計算＋線形探索」の回数を指定します。標準で 1 回が設定されますが、必要に応じて増やしてください。入力した初期構造にも依りますが、一般に、十分に構造を最適化するには、このセットを多数回行う必要があります。振動解析は、用いる理論と基底系での、最適構造（の近く）で実施する必要があります。“Times” で振動解析の前に実行する構造最適化セットの回数を指定できます。標準で 1 回が設定されますが、必要に応じて変えてください。ゼロ回も指定可能です。入力構造がその理論と基底系での最適構造に十分近い確信がある場合はゼロ回を指定して構いません。

[注意]

計算にかかる時間は、分子の大きさや計算の種類や基底系の選択によって、大幅に変わります。実際に、一瞬で終わる計算もあれば、数時間かかる計算もあります。なので、設定を変更して初めて計算を実行するときは、時間がかかる可能性を念頭に置いてください。一般に、勾配計算を多数回必要とする構造最適化と振動解析は計算量が多く、時間が掛かります。小さくない分子で構造最適化や振動解析を行う場合は、例えば、最も簡素な STO-3G 基底系から試す、事前に勾配計算を行って所用時間を予想する、などの注意が必要です。

[任意の分子]

ショートカット 01.Quantum では、与えられた特定の分子と原子しか計算することができません。その他の分子を計算したい場合は、ショートカット 02.Editor の方を使います。このプログラムは、Molecule.exe という名の実行可能ファイルに渡す input ファイルを作成するエディタですが、そこから直接に計算を開始する事もできます。

起動時には、例として、Glycine を計算する場合の入力が表示されています。この例の様に、一番下の枠に、計算したい分子を構成する全ての原子の記号と座標を、1 行に 1 原子ずつ羅列します。これで任意の分子の指定が可能になります（任意と言っても原子の数は 200 個までに制限しています。また、使える原子は、STO-3G, 3-21G 基底系では Xe まで、diffusive 基底無し の 6-31G 型基底系では Kr まで、diffusive 基底入りの 6-31G 型基底系と 6-21G 基底系では Ar までです。）原子の座標は、デカルト座標を [Å] 単位で指定します。Z-matrix 形式には対応してません。原子記号と座標の羅列は、Avogadro 等の分子エディタを利用して生成し、貼り付けると良いです。幾つかの input ファイルの例が、Sample フォルダの下 の Input フォルダの中にあります。

必要項目を設定して Save ボタンをクリックすると、適当な名前の付いた input ファイルが生成され、Run フォルダに保存されます。これを計算サーバーに移し、Molecule.exe に引数として与えて計算を実行する。計算の微調整には追加の引数で parameter ファイルを渡す。これが元々想定していた手順です。しかし、この手順には計算サーバー上に別途 Molecule.exe が必要になります。

Save ボタンの代わりに Submit ボタンをクリックすると、計算サーバーを使わずに、input ファイルを作成している Windows パソコン上でそのまま続けて、計算を開始できます。(Save も事前に行われます)。その後はエディタを終了しても構いません。エディタが終了しても計算は継続されます。もちろん、input ファイルを一旦保存してから、コマンドプロンプト等で Molecule.exe を実行する事もできます。計算の完了は、出力ファイルのサイズや CPU 使用率の低下などから判断してください。強制終了したい場合はタスクマネージャを使ってください。

元々、Molecule.exe は、必ずしも対称性を持たない一般の分子を対象にしています。なので、たとえ分子に対称性があったとしても、対称性は利用されません。そのぶん計算時間は長くなります。パソコン上で Molecule.exe を走らせるのは、比較的小さい分子（アミノ酸程度まで）に限った方がよいです。それ以上の大きな分子（ペプチドやたんぱく質）は、長い時間がかかるので、パソコンではやらない方がよいです。

[履歴]

2023 年 07 月 17 日 紫外線可視光吸収スペクトルの計算を追加。
2022 年 05 月 09 日 分極率とラマン散乱スペクトルの計算を追加。
2021 年 08 月 14 日 赤外線吸収スペクトルの計算を追加。
2020 年 11 月 12 日 基底関数系の実装を変更。電子反発積分内の再計算を削減。
2020 年 10 月 03 日 構造最適化を改良。諸々の再計算を削減。
2020 年 04 月 22 日 混成汎関数を追加。拡散基底を追加。
2020 年 01 月 04 日 幾つかの分子を追加。
2019 年 11 月 26 日 振動解析を追加。
2019 年 10 月 28 日 MP2 一点エネルギー計算を追加。
2019 年 09 月 10 日 最初のリリース候補。このファイルを作成。