

Gaussian ワークショップ開催報告

平成30年8月27～31日の5日間に渡り、南4号館3階実習室において、Gaussian ワークショップ2018を東京工業大学 学術国際情報センター 計算化学研究会とGaussian社の共催、およびNVIDIA Japanの協賛で開催した。今回のGaussianワークショップは前回のGaussianワークショップ2016から2年振りの開催となり、71名の参加者があった。

Gaussian 16は、スパコンTSUBAME3.0にもインストールされ、非常に多くのユーザにご利用いただいている量子化学計算プログラムであり、ノーベル賞を受賞したJ. A. Pople博士（注1）らによって開発され、現在も全世界で圧倒的シェアを誇っている。元々は計算化学の分野で利用されていたが、PCの高速化により計算化学が身近になったことや、量子化学の理論とプログラムの改良によって実験値を高精度で再現可能となったことにより、現在では多くの実験家も日常的に利用するようになっている。

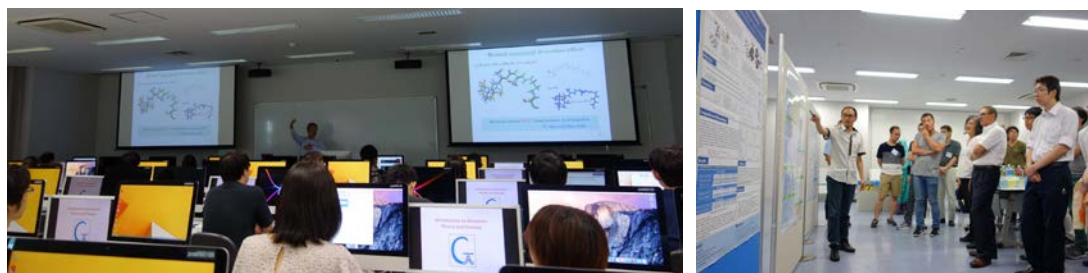


写真：特別講演の中辻先生(左)と Gaussian を開発している 4 名の教授陣による講義

Gaussian ワークショップは年数回のペースにて世界各地で開催されており、東工大での開催は2016年9月以来2年振り3回目となる。開催地として前回に引き続き東工大が選ばれた理由は、世界トップレベルのスパコンTSUBAME3.0の存在、大人数による演習が可能な整ったPC端末利用環境、東工大の所属者以外も利用可能なGaussianライセンスの保持、そして海外からの参加者のためのアクセスの良さなどが挙げられる。

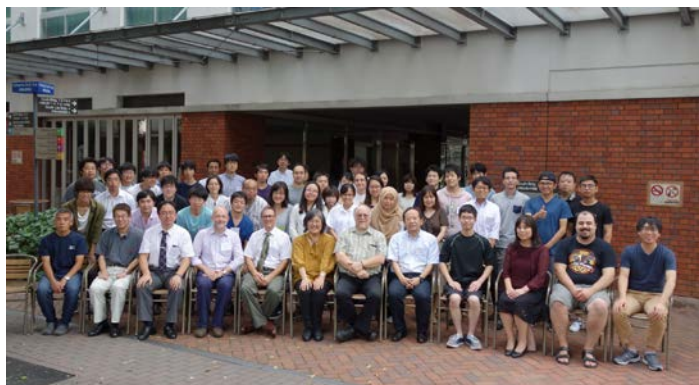
ワークショップのスケジュールは午前9時～午後6時の間に講義とハンズオンの演習があり、第2演習室にて行われた。講義は英語で行われ、分子軌道法の基礎的な理論から応用研究に利用可能な新機能までの幅広い内容について、Gaussianを開発している4名の教授陣による丁寧な説明があった。参加者からは理論的な質問のみならず、実際の計算において直面している具体的な質問も数多く出され、プログラムの利用方法を踏まえた詳細な回答がなされた。演習では、全ての参加者がPC端末のGaussian 16とGauss View 6を用いて、実践的な計算方法を学んだ。

ワークショップ初日には、Gaussian 16の開発者でもある中辻博先生（京都大学名誉教授、



写真：参加者の様子（左：中辻先生の特別セミナー中、右：ポスターセッション中）

量子化学研究協会 研究所長) による特別セミナーもあり、最先端の研究成果をご講演いただいた。また前回に引き続き、参加者によるポスターセッションも行われ、参加者が実際に扱っている研究対象において、Gaussianを利用してどのような成果を上げているかを、講師の先生方や他の参加者と議論した。ワークショップで取り上げるのは一般的な内容とな



写真：Gaussian ワークショップ 2018 参加者の集合写真

るが、ポスターセッションを行うことで参加者が直面している個々の問題を詳細に議論することができ、より理解を深めることに繋がる良い取組みと好評だった。

本ワークショップの1週間が、これから計算化学を始めたい実験化学者から量子化学を専門とする研究者までの多くの参加者に対して有意義なものとなったことを期待したい。

注1 J. A. Pople博士： 実験データに基づく経験的パラメータを一切用いない非経験的分子軌道法の普及の功績により1998年にノーベル化学賞を受賞