

# 量子化学計算パッケージ GAMESS の概要と利用法

神戸大学発達科学部 人間環境科学科  
蛭名 邦禎

量子化学計算とは、原子核の配置を指定したときの電子の量子力学的な状態を、電子に対する Schrödinger 方程式を数値的に解くことによって求め、得られた波動関数を用いて種々の物理量を求めることを可能にするものである。これは、分子構造計算はもちろん、化学反応を微視的に理解するための基礎を提供する。最近の計算機の発展に伴って、高分子や大きなクラスターに対しても適用可能となりつつあり、量子化学計算は、もはや「化学」のためだけのものではなく、物質を扱う自然科学の多くの分野で重要な道具となってきている ([1])。しかし、これまで、神戸大学においては、公に利用できる量子化学計算環境は存在しなかった。このたび、総合情報処理センターの研究開発計画の一環として、こうしたパッケージの一つである GAMESS を Convex 上に導入することになったので、その概要と利用法を簡単に紹介したい。

GAMESS とは The General Atomic and Molecular Electronic Structure System の略で、原子や分子の電子状態に関する *ab initio* 量子化学計算のためのパッケージである。このプログラムは、1970 年代の末に、アメリカ・エネルギー省の NRCC (National Resources for Computations in Chemistry) プロジェクトのメンバーによって、HONDO など幾つかの既存の量子化学計算プログラムを集大成して作られた ([2])。プログラムは無償で公開され、その後、多くの改良を経て今日に至っている。その多くは、North Dakota State University (NDST) と Iowa State University (ISU) でなされ、現在は ISU の Ames Laboratory で Michael W. Schmidt が中心となって改良が続けられている ([3])。

GAMESS では、原子番号  $Z=103$  までの任意の元素を含んだ「分子」の波動関数と種々の物理量を計算することができる。原子番号  $Z=1$  の水素から  $Z=86$  のラドンまでの元素（ランタノイドを除く）に関しては、組み込みの基底関数が用意されている。単純な閉殻の SCF (self-consistent-field) から、一般の MCSCF (multiconfiguration self-consistent-field) まで各種の段階の波動関数を扱うことができる。本来 *ab initio* 計算とは、各原子核の電荷（原子番号  $Z$ ）とその幾何学的な配置、および全電子数のみをインプットとして、すべての電子に対する波動関数を経験的なパラメータを用いずに計算するものである。GAMESS では、そのほかに MOPAC 6 の一部を含む半経験的な波動関数や、外殻電子に対する有効内殻ポテンシャルを用いることもできる。

このプログラムは、ほとんどすべてのまともな UNIX ワークステーションやスーパーコンピュータに対応しており、ベクトル演算や並列処理計算が可能になっている。現在、とりあえ

ず、Convex のベクトル演算に対応した非並列処理版の seqgms をインストールしてある。近いうちに、並列処理計算版 (pargms) もインストールする予定である。seqgms は、正確には非並列版 GAMESS を実行するためのシェルスクリプトであり、/home/gamess/bin に置かれている。本体のバイナリファイルは /home/gamess/gamess の中に格納されている。ソースプログラムは、/home/gamess/gamess/source の中に 92 個のファイルに分かれて格納されている。また、マニュアルは /home/gamess/documents の中に

```
INTRO.DOC  (Section 1 - Overview)
INPUT.DOC  (Section 2 - Input Description)
TESTS.DOC  (Section 3 - Input Examples)
REFS.DOC   (Section 4 - Further Information)
PROG.DOC   (Section 5 - Programmer's Reference)
IRON.DOC   (Section 6 - Hardware Specifics)
```

の 6 つのファイルに分かれている (これらを全部印刷すれば 200 ページを越えるだろう)。

Convex system (comet) のユーザーは

```
/home/gamess/bin/seqgms JOB
```

とたたくことによってこのプログラムを起動することができる。ここで、JOB はジョブ名で、JOB.inp という名前のインプット・ファイルを用意しておくことが必要である。この長いフルパス名をたたく代わりに、ユーザの .login ファイルに

```
alias gms `nice +15 /home/gamess/bin/seqgms`
```

という行を入れておけば、

```
gms JOB >& JOB.log &
```

とただただで済むことになる。こうすれば、計算はバックグラウンドで処理され、出力は JOB.log というファイルに書き込まれる。

インプット・ファイルの記述の仕方は、INPUT.DOC に書かれているが、これを表示するためのシェルスクリプトが

```
/home/gamess/bin/gmshelp
```

である。インプット・ファイルの例 (TESTS.DOC) を参照するためのシェルスクリプトとして

```
/home/gamess/bin/gmsexmp
```

を用意した。これらのヘルプ機能を簡単に利用するために、やはり .login ファイルに

```
alias gmshelp /home/gamess/bin/gmshelp
```

```
alias gmsexmp /home/gamess/bin/gmsexmp
```

という行を入れておくとよい。そうすれば、gmshelp または gmsexmp とただただで上記のドキュメント・ファイルを参照できる。

GAMESS のパッケージは、ISU の Mike Schmidt から 151 通のメールに分割されて届けられた。これらはソースプログラムと幾つかのシェルスクリプトおよびドキュメントなどを含んでおり、総量は約 6 MB である。これをインストールするのは、read.me.lst と readme.unix の記述に従えばよいので原理的には簡単であるが、icluna のメールシステム (mailx) のバグのせいでソースコードによけいな文字が入り込むなどのトラブルで、インストールに時間がかかってしまった。本来なら、今頃 (1993 年 12 月 28 日) は、だいぶ使い込んでいるはずであっ

たが、やっとインストールが済んだところである。ただし、このパッケージにはコンパイルが無事完了したかどうかをチェックする例題がついていて、それは実行してうまくいっていることは確認済みである。

GAMESS のパッケージを手に入れるには、

mike@si.fi.ameslab.gov

にあてて直接 Mike Schmidt に電子メールで依頼する必要がある。依頼主は、必ずしもとりわけ民主的な国に住んでいる必要はないが、少なくともその国の政府が学生に向かって戦車を発進させるような政策を持っていないことが必要であると INTRO.DOC 中の "Distribution Policy" の項に記載されている。このパッケージを手に入れたものは、その使用に先立って、使用条件を明記した手紙を Mike Schmidt あてに出す必要がある（その雛形は、パッケージの中に、GAMESS.LETTER というファイル名で入っている）。私自身、Mike あてに、以下の4つの条件での使用願いを出しているので、神戸大学内に限り誰でもこのプログラムを自由にコピーし、どの計算機においても無償で使うことができる。よその機関で使う際には、直接メールで依頼していただきたい。

使用条件：

1. どんな理由であっても、自分の研究機関（神戸大学）以外の誰にもコピーを配布しない。必要なら、直接 Mike Schmidt にコピーを要求するように促す。
2. GAMESS の著作権と所有権が ISUQCG (Iowa State University Quantum Chemistry Group) にあることを認識する。そこからの許可無しには、このプログラムのどんな部分でも他のシステムに組み込むことはしない。
3. GAMESS のような大きなプログラムは決して bug free ではあり得ないことを認識し、提供されるままのもの以外のどんな責任や保証も要求しない。
4. 科学的な文献の出版の際の引用において、QCPE (Quantum Chemistry Program Exchange) の Bulletin で最新の記載のなされた巻号と著者名、および 1980 年のオリジナル版の著者名を明記する（この文章の参考文献 [3], [2] がそれにあたる）。

GAMESS に関する質問も Mike Schmidt が受け付けている。ドキュメントには電話番号も記載されているが、"E-mail is much, much, much preferred to phone calls!" と注記されている。

最後に、量子化学計算が初めての人のために、参考書を 2-3 紹介しておこう ([4]-[6])

#### 参考文献

- [1] P. Fulde, Electron Correlations in Molecules and Solids, 2nd ed., Springer-Verlag, 1993.
- [2] M. Dupuis, D. Spangler, J.J. Wendoloski, National Resource for Computations in Chemistry Software Catalog, University of California, Berkeley, CA, Program QG01, 1980.

- [3] M.W. Schmidt, K.K. Baldrige, J.A. Boatz, J.H. Jensen, S. Koseki, M.S. Gordon, K.A. Nguyen, T.L. Windus, S.T. Elbert, QCPE Bulletin,10,52-54 (1990).
- [4] 藤永 茂：『入門 分子軌道法：分子計算を手がける前に』（講談社, 1990）.
- [5] 米沢貞次郎ほか：『量子化学入門（上・下）』（化学同人, 1983）.
- [6] A. ザボ, N.S. オストランド：『新しい量子化学（上・下）：電子構造の理論入門』（東京大学出版会, 1987）.