

計算化学実践レクチャー 実施報告書

文責：立教大学 山中 正浩

1. 開催の経緯

有機触媒研究会会員を対象として、実践的な計算化学の講習会（講師：立教大学 山中正浩、2026/9/3~4）を開催した。本講習会は、量子化学計算を実際の有機触媒の開発研究に活用するための実践的な知識と技術を身につけることを目的としたものである。開催にあたっては、有機触媒研究会会員に対して参加希望者を募集した。今回は立教大学での対面形式による実施であったため参加人数に制限を設けた。募集案内では、計算内容を考慮したうえで参加者を決定することを周知し、所定の期間内に申し込みを受け付けた。申し込み案内は有機触媒研究会のウェブサイトを通じて行った。

2. 実施概要

講習会は、立教大学池袋キャンパスにおいて 2 日間の日程で実施した。量子化学計算の基礎的な考え方から、実際の計算機サーバーを用いた計算、構造最適化、遷移状態（TS）構造の最適化、計算結果の確認までを一連の流れとして扱った。

日時	9/3~4、両日とも 10:00~18:00（昼休みを含む）
場所	立教大学池袋キャンパス 4 号館 4234
対象	有機触媒研究会会員
参加者	浅野圭祐（北大）、博士課程学生 1 名（阪大 鳶巣研）、修士課程学生 2 名（農工大 加納研）

参加者各自の Windows PC を用い、以下のソフトウェアを使用した。

- GaussView：計算構造の作成・編集
- TeraTerm：計算機サーバーの操作
- WinSCP：計算ファイルの転送
- TeraPad：計算入力・出力ファイルの編集・確認
- CYLview：計算構造の 3 次元表示

また、立教大学内 LAN への接続に必要な臨時 ID を参加者に発行し、外部から計算機サーバーへアクセスする場合には VPN 接続を利用し、講習終了後も各自の研究環境から計算を継続して実施できる環境を構築した。

3. 講習内容

講習では、単に計算ソフトの操作方法を学ぶのではなく、各人の研究テーマに沿って、量子化学計算を利用する際に必要となる一連の流れ（1）～（5）を実践的に学習した。

(1) 計算機サーバーの利用方法

量子化学計算を計算機サーバー上で実行するため、サーバーへの接続方法、計算の実行方法、計算終了後のファイルの取得方法について説明した。TeraTerm を用いたサーバー操作と WinSCP によるファイル転送を実際に行い、ローカル PC と計算サーバーを使い分けながら計算を進める方法を確認した。

(2) GaussView による初期構造の作成

GaussView を用いて分子構造を作成し、量子化学計算に必要な入力構造を準備する方法を実習した。計算対象となる分子の構造を適切に設定することの重要性についても説明した。

(3) 量子化学計算の実践

実際に計算入力ファイルを作成し、サーバー上で量子化学計算を実行した。計算条件の設定方法や計算の流れを確認するとともに、入力ファイルの作成や計算の実行における注意点を学習した。

(4) 遷移状態 (TS) の構造最適化

遷移状態の構造最適化計算を実践した。安定構造と遷移状態構造での構造最適化の違いについて説明し、実際の計算を通して遷移状態を探索する方法を学習した。

(5) 計算結果・出力ファイルの確認

計算終了後の出力ファイルを実際に確認し、構造、エネルギー、振動数など、量子化学計算から得られる情報の読み取り方を説明した。

4. まとめ

本レクチャーでは、量子化学計算に必要となるソフトウェアの操作方法だけでなく、計算機サーバーの利用から計算の実行、TS 構造の最適化、出力ファイルの確認までを実践的に扱った。参加者が自身の研究対象について量子化学計算を実施するための基本的な操作と考え方を身につけ、今後、実験研究と計算化学を組み合わせるための基礎を習得することを目的とした講習であった。今後、要望に応じて同様の講習会の実施に向けた基盤を整える機会となった。今回の講習を通じて、有機触媒研究における計算化学の実践的な活用が進み、開発研究を促進する一助となれば幸いである。

