

準備: Webブラウザをインストール

- 推奨

- Google Chrome



- <http://www.google.com/intl/ja/chrome/browser/>

- 可

- Safari
- Mozilla Firefox
- Internet Explorer 11以降

- 非対応

- Internet Explorer 10以前

GRRMプログラム利用法実習1

Web接続とGRRMガイド

量子化学探索研究所 客員研究員

渡邊 啓正

実習1目次

1. 本チュートリアル^の資料ページへの接続
2. GRRM14プログラム^{無料お試し}のご案内
3. Test Job ^のご案内
4. GRRM^{で見る}化学の世界 ^のご案内

チュートリアル資料ページ

<http://iqce.jp/GRRM-T>

をWebブラウザで開きましょう

NPO法人 量子化学探索研究所 x

← → ↻ ⓘ iqce.jp/GRRM-T/ ☆

特定非営利活動法人
量子化学探索研究所
Institute for Quantum Chemical Exploration

量子化学で世界を変える

■ ホーム

■ 概要・沿革

■ 入会案内

■ →会員Page

IQCE会員向け情報
GRRMuserGuide →見本
IQCE-News →見本

■ 連絡先

■ イベント情報

■ 公募情報

■ GRRMプログラム

■ 新GRRMプロジェクト

■ GRRM-GDSP DEMO

GRRM-T 2017 (更新: 2017/06/21 10:43)

GRRMチュートリアル2017

GRRM総研会として「GRRMチュートリアル2017」が開催されます

日時: 7月6日(木) 10:00~14:30
会場: 東京国立自然史博物館特別展示室(100-83)
主催: 東京国立自然史博物館(東京国立自然史博物館)
協賛: 東京大学大学院理学系研究科(東京大学)
協理: 大野浩一 (IQCE専任理事、東京大学名誉教授)
幹事: 藤田大輔 (東京大学名誉教授)
実行委員長: 石谷正和 (東京大学名誉教授)
実行委員: 石谷正和 (東京大学名誉教授)

チュートリアル概要

- 古くは材料講座
- 古くは材料科学の発展 (大野浩一)
- エネルギーと材料 (藤田大輔)
- 光触媒と材料 (藤田大輔)
- 材料とコンピュータ (藤田大輔)
- 材料とコンピュータ (藤田大輔)
- IQCE
- 受講対象
- 工学・理学・工学系大学院生、修士課程以上
- 基礎的な量子化学の知識を有する方
- IQCE会員の方(優先的に募集します)
- 古くは材料科学の発展 (大野浩一)
- GRRMチュートリアル2017 (大野浩一)
- 受講に当たっての必要な準備
- 東京国立自然史博物館のホームページを参照してください
- 受講によって得られる知識
- 基礎的な量子化学の知識と最先端の量子化学の発展に関する知識 (大野浩一) 4時間分の基礎知識を得られます
- 学生スタッフの参加
- 東京国立自然史博物館の学生スタッフ(2名)とIQCEの学生スタッフ(2名)が参加します (藤田大輔)
- 「量子化学」大野浩一 (大野浩一)
- 参加費: 300円 (先着順に限り無料となります)
- 参加費
- 一般: 1日(10:00~14:30): 3,000円 (授業料: 2,000円)
- 学生: 1日(10:00~14:30): 1,500円 (授業料: 1,000円)
- 学生: 1日(10:00~14:30): 2,000円 (授業料: 1,500円)
- 10:00~14:30: 1,000円 (授業料: 500円)
- 参加費納入
- 授業料納入: 授業料納入の申し込みは、東京国立自然史博物館のホームページから行えます
- 授業料納入: 授業料納入の申し込みは、東京国立自然史博物館のホームページから行えます
- 授業料納入: 授業料納入の申し込みは、東京国立自然史博物館のホームページから行えます
- 授業料納入: 授業料納入の申し込みは、東京国立自然史博物館のホームページから行えます
- 参加申し込み
- 参加申し込み: 2017年6月30日(木)まで
- 参加申し込み: 2017年6月30日(木)まで
- 参加申し込み: 2017年6月30日(木)まで
- 参加申し込み: 2017年6月30日(木)まで

IQCE Web: <http://iqce.jp/>

GRRM14無料お試しの申し込み方法

<http://iqce.jp/GRRM-T>

GRRMプログラム無料お試し

- GRRMプログラム（GRRM14）が30日間無料でお試しいただけます。
☆☆☆☆☆ [GRRM14無料お試しはこちら](#) ☆☆☆☆☆

Science Technology Inc.

Home STLib **GRRM** Network Install System 会社概要 お問い合わせ

GRRM 無料お試し版のご案内

GRRM無料お試し版は、GRRMの研究利用・産業利用の促進を図るべく提供している、GRRM利用者専用のお試しリリースです。

1. システムの仕様

GRRMをご検討中の皆様にご利用いただきやすいよう使用期間限定で無料提供いたします。

- **GRRM14**を無料で1ヶ月間ご利用いただけます。
 - 申込みは、各一人様一席限りとなります。
 - 申込みにはクレジットカードの登録が必要となります。
 - 期間は30日です。延長は出来ません。
 - 使用が可能なOSはWindows 8.1、Windows 10に限定させていただきます。
 - 電子決済が課金プログラムが使える環境であることが条件です。
 - GRRM-STLibを使用します。
- 下記のCONTACTフォームよりお申込み下さい。利用受領後、下記をお送りいたします。
 - STLibとインストールのご案内
 - GRRM14バイナリーとマニュアル
 - チュートリアル（お試しJOBの別本）
 - お試し期間利用通知書

[Contact Form \(お申込み\)](#)

Copyright © 2013 Science Technology

Test Job

- GRRMの様々な計算手法やオプションのサンプル



はじめに.....	1
Test JOB のリスト.....	2
1. 構造最適化 (TJ01)	3
2. 基準振動解析 (TJ02)	5
3. 遷移構造最適化 (TJ03)	6
4. 固有反応座標追跡 (TJ04)	7
5. 二点間遷移構造最適化 (TJ05)	8
6. 二点間中間体探索 (TJ06)	9
7. 反応経路網全面自動探索 (TJ07、TJ08、TJ09、TJ10)	10
① TJ07.....	10
② TJ08.....	11
③ TJ09.....	12
④ TJ10.....	13
8. 構造の自動再最適化 (TJ11)	15
9. エネルギー値自動再計算 (TJ12)	16
10. 立体配座探索 (TJ13)	17
11. クラスタ構造探索 (TJ14、TJ15)	19
① TJ14.....	19
② TJ15.....	21
12. AFIR 解析 (TJ16、TJ17、TJ18、TJ19)	23
① TJ19.....	25
13. 合成経路(Synthon)解析 (TJ20)	27
14. ポテンシャル交差解析 (TJ21、TJ22、TJ23)	28
① TJ21.....	28
② TJ22、TJ23	29
15. 反応経路網 ONIOM 解析 (TJ24、TJ25、TJ26)	31

GRRMで見る化学の世界

GRRMで見る化学の世界

GRRMで見る化学の世界 .pdf Chemical Adventure .pdf

Movie 1

Movie 2

Movie 3

©2017, Koichi OHSO

GRRMで見る化学の世界

H₂CO₂

準備：インターネットに接続できる状態で、このPDFを開きます。
 ブラウザの側面のアドレス欄によって、自動で接続されることとなりますので、ご確認ください。以下は、ブラウザにGoogle Chromeを用いた場合を例にとって説明をいたします。

1. ブラウザへのGRRM-GZIPの表示と閲覧
 まず、次のURLに接続しましょう。(開くボタンをクリックすると接続されます。)
http://www.nrc.go.jp/RESOURCES/CI/CI01/01_01/01_01_01.html

ブラウザの上端には「GRRM-GZIP」というタブが現れ、アドレス欄の横には化学式「H₂CO₂」が表示されています。

アドレス欄の横に「化学式」が表示されている場合は、H₂CO₂の「反応経路」も、いくつかの表示が可能です。●のボタンをクリックすると、反応経路の表示が切り替わります。

ブラウザの表示状態は、以下の図のとおりです。

ここで、お好みのボタンをクリックして、反応経路を確認します。

- のボタンをクリックすると、反応経路の表示が切り替わります。
- のボタンをクリックすると、反応経路の表示が切り替わります。
- のボタンをクリックすると、反応経路の表示が切り替わります。

●のボタンをクリックすると、反応経路の表示が切り替わります。

©2017, Koichi OHSO

Chemical Adventure

H₂CO₂

5個の原子 H₂CO₂ が盛りだぶる化学の世界を探検してみましょう！

はじめに

化学の世界は、原子の異なる組み合わせによって様々な物質を生み出し、多様な変化を伴います。いくつかの原子が異なる組み合わせをすることで、異なる物質が生まれます。異なる物質の異なる原子の異なる組み合わせによって、異なる物質が生まれます。異なる物質の異なる原子の異なる組み合わせによって、異なる物質が生まれます。

化学の世界は、原子の異なる組み合わせによって様々な物質を生み出し、多様な変化を伴います。いくつかの原子が異なる組み合わせをすることで、異なる物質が生まれます。異なる物質の異なる原子の異なる組み合わせによって、異なる物質が生まれます。異なる物質の異なる原子の異なる組み合わせによって、異なる物質が生まれます。

GRRM Animation 1

CH₄ + CO₂ → HCOOCH₃

メチル基非反応物動機構
 E03 - 190 - 0.4 0.02
 70.6 - 437.2 - -8.0 kJ/mol

メチル基反応物動機構
 E03 - 192 - 0.4 0.02
 70.6 - 436.9 - -8.0 kJ/mol

プロトンリレー

GRRM Animation 2

H₂ + N₂ → HN=NH

E0700 - 185 - F01
 156.2 - 407.6 - 24.9 kJ/mol

N₂ + CO → N₂C=O

E0000 - 183 - E00
 -217.4 - -10.6 - 0.0 kJ/mol

GRRM Animation 2B

CO₂ + NH₃ → NH₂COOH

E0000 - 182.0 - F01
 2.6 - 177.7 - 22.1 kJ/mol

CH₃OH + CO → CH₃COOH

E0000 - 181.4 - E00
 -117.7 - 429.4 - 0.0 kJ/mol

反応経路のムービーを
 ご自身の目でどうぞお確かめ下さい!!

GRRM-GDSP

- GRRMプログラムの探索結果を可視化するツール

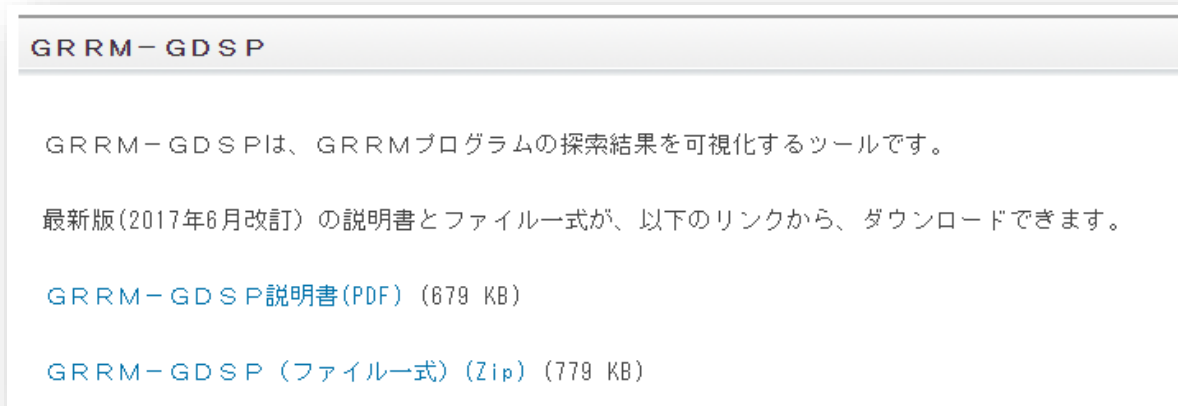
出力ファイルの在るフォルダで
GDSPのコマンドを実行する



解析・整形結果がHTML形式で出力される



GDSP.HTMファイルをWebブラウザで開く



GRRMプログラム利用法実習2

GRRMの実演と解説

量子化学探索研究所 客員研究員

渡邊 啓正

実習2目次

1. GRRM14ジョブ投入の実演
2. 出力されるファイルの確認
3. GRRM-GDSPによる可視化の実演

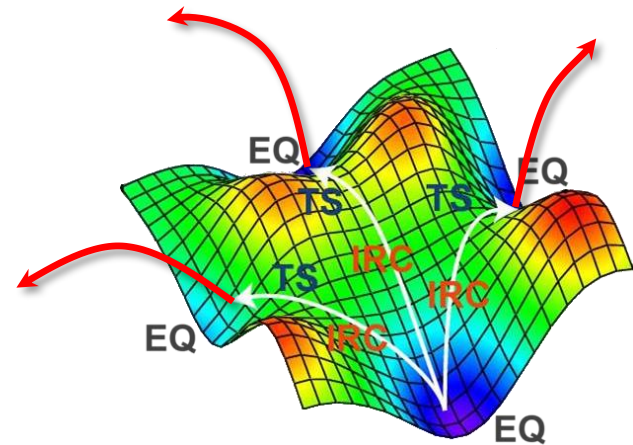
GRRM14のファイル構成

- インストールされているノードでPATHが通っている:
 - GRRMp … GRRMのノード内並列処理部
 - GRRM.out … GRRM中心部
- このほか、量子化学計算エンジンが内部的に呼び出される
 - 環境変数で指し示す
 - 詳細はGRRM14インストールマニュアルを参照

GRRMの起動方法

\$ **GRRMp**_インプット名_オプション_&

- インプット名から「.com」を省略可能
- オプション:
 - $-p[n]$
 - GRRMの作業の並列処理数 n
 - $-h[m]$
 - 計算時間上限値 m hour



GRRMの終了手順

- 所定ファイルを作成:

```
$ touch_入力名_message_STOP.rrm
```

- 量子化学エンジンが止まるまで
数分程度かかることがある

GRRMの入力ファイル仕様

GRRM、MINなど

RHF/6-31Gなど

```
# [Job type]/[Ab initio method]

[Charge] [Spin multiplicity]
[Chemical symbol of atom 1] [Cartesian coordinates of atom 1]
[Chemical symbol of atom 2] [Cartesian coordinates of atom 2]
[Chemical symbol of atom 3] [Cartesian coordinates of atom 3]
[Chemical symbol of atom 4] [Cartesian coordinates of atom 4]
...
Options
[Option 1]
[Option 2]
[Option 3]
[Option 4]
[Option 5]
...
```

GauProc=??

LADD=??

など

動作状況を確認するには

```
$ top
```

```
top - 12:05:01 up 6 days, 17:48, 1 user, load average: 1.28, 1.42, 1.31
Tasks: 522 total, 6 running, 516 sleeping, 0 stopped, 0 zombie
Cpu(s): 11.3%us, 8.9%sy, 0.0%ni, 77.8%id, 1.7%wa, 0.0%hi, 0.4%si, 0.0%st
Mem: 132271884k total, 5588712k used, 126683172k free, 512568k buffers
Swap: 7999992k total, 0k used, 7999992k free, 2193028k cached
```

PID	USER	PR	NI	VIRT	RES	SHR	S	%CPU	%MEM	TIME+	COMMAND
5059	hpc	20	0	2151m	11m	856	D	29.7	0.0	0:00.47	1508.exe
5071	hpc	20	0	2146m	141m	2332	R	17.7	0.1	0:00.28	1302.exe
5074	hpc	20	0	2146m	141m	2332	R	15.8	0.1	0:00.25	1302.exe
5077	hpc	20	0	2146m	138m	2148	R	14.5	0.1	0:00.23	1302.exe
4639	hpc	20	0	15304	1580	944	R	1.3	0.0	0:00.26	top
4479	hpc	20	0	101m	1908	1028	S	0.0	0.0	0:00.03	sshd
4481	hpc	20	0	110m	2900	1244	S	0.0	0.0	0:00.28	tcsh
4630	hpc	20	0	79164	4756	3244	S	0.0	0.0	0:00.09	GRRMpST
4633	hpc	20	0	79164	1812	300	S	0.0	0.0	0:00.02	GRRMpST
4661	hpc	20	0	79164	1812	300	S	0.0	0.0	0:00.01	GRRMpST
4710	hpc	20	0	79164	1812	300	S	0.0	0.0	0:00.01	GRRMpST
4792	hpc	20	0	79164	1812	300	S	0.0	0.0	0:00.00	GRRMpST
5057	hpc	20	0	103m	1220	1036	S	0.0	0.0	0:00.00	sh
5058	hpc	20	0	90336	952	752	S	0.0	0.0	0:00.00	g09
5069	hpc	20	0	103m	1212	1036	S	0.0	0.0	0:00.00	sh
5070	hpc	20	0	90336	952	752	S	0.0	0.0	0:00.00	g09
5072	hpc	20	0	103m	1220	1036	S	0.0	0.0	0:00.00	sh
5073	hpc	20	0	90336	948	752	S	0.0	0.0	0:00.00	g09
5075	hpc	20	0	103m	1220	1036	S	0.0	0.0	0:00.00	sh
5076	hpc	20	0	90336	952	752	S	0.0	0.0	0:00.00	g09

```
$ cat_インプット名.log
```

```
$ ls_インプット名_message*
```

GRRMの出力ファイルの構成 (*log)

- .logファイル: 探索履歴、計算量、計算時間など
- EQ_list.log: 安定構造のリスト
- EQ n .log: EQ n からのADDF探索の履歴、
ADDF経路に沿った構造およびエネルギー変化
- TS_list.log: 遷移状態構造のリスト
- TS m .log: TS m からのIRC計算結果
- DC_list.log: 解離構造のリスト
- DC m .log: DC m からのmeta-IRC計算結果

GRRMの出力ファイルの構成 (*rrm)

- xxx_message_CONTINUE.rrm
 - 計算実行中に現れ続ける
- xxx_message_END.rrm
 - ジョブ正常終了時に生成される
- xxx_message_ERROR.rrm
 - GRRM固有のエラー停止時に生成される
- xxx_message_LinkERROR.rrm
 - 量子化学計算エンジンのエラーによる停止時に生成される
 - Gaussianエラー原因を探るには
xxx_GauJOB.com と xxx_GauJOB.log を確認する

EQ_list.log

List of Equilibrium Structures

Geometry of EQ 0, SYMMETRY = Cs

H	-0.452596548000	0.034871834140	-1.807771705495
O	-0.452596548000	0.643013717456	-1.034349518878
O	-0.452596548000	-1.276412777953	0.242743092264
C	-0.452596548000	-0.053534532177	0.147136623161
H	-0.452596548000	0.652061759532	0.979506709948

Energy = -189.686345910766 電子エネルギー (hartree)

Spin(**2) = 0.000000000000

ZPVE = 0.033269502369 ゼロ点振動エネルギー (hartree)

Normal mode eigenvalues : nmode = 9

0.013844532	0.017705839	0.041505728	0.043865003	0.063830393
0.075651074	0.114134257	0.376915991	0.486564365	

振動固有値 f_i

振動数 (cm^{-1}) への変換:

$\text{sqrt}(f_i/1822.88853006256)*219474.638170777$

EQn.log

PROFILE OF SHS-PATH 1

Initial geometry (negative direction of mode 1)

H	-0.273098290958	0.034871834140	-1.807771705495
O	-0.470810700199	0.643013717456	-1.034349518878
O	-0.461175866010	-1.276412777953	0.242743092264
C	-0.434217247418	-0.053534532177	0.147136623161
H	-0.425702172635	0.652061759532	0.979506709948

STEP 1 E(Harmonic) = 0.001382748031

GENERATION = 1

H	-0.427536180483	0.033981498650	-1.806811316248
O	-0.450816718537	0.643825451874	-1.035605196155
O	-0.448164828929	-1.276628047144	0.242624857766
C	-0.470612689786	-0.053172482437	0.150438437675
H	-0.361723584567	0.639174894802	0.961037157834

energy : -189.685073971923

Spin(**2) : 0.000000000000

STEP 2 E(Harmonic) = 0.015363867007

~~~中略~~~

Another EQ was reached over the TOP of SHS-PATH 出発点とは別のEQへ到達した

# TS\_list.log

## List of Transition Structures

# Geometry of TS 0, SYMMETRY = C2v

|   |                 |                 |                 |
|---|-----------------|-----------------|-----------------|
| H | -0.452579896769 | -0.739634023903 | -1.194712914423 |
| O | -0.452568723828 | 0.622484509496  | -1.029441079169 |
| O | -0.452556518725 | -1.176022414821 | 0.106195948153  |
| C | -0.452547834023 | 0.119374517004  | 0.165753891233  |
| H | -0.452526289353 | 0.696601689310  | 1.079890807874  |

Energy = -189.621177046091

Spin(\*\*2) = 0.000000000000

ZPVE = 0.028318278608

Normal mode eigenvalues : nmode = 9

|              |             |             |             |             |
|--------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| -0.134645676 | 0.026856941 | 0.040118575 | 0.052256091 | 0.054695965 |
| 0.065556445  | 0.091473665 | 0.154739450 | 0.409107921 |             |

CONNECTION : 0 - 0 EQ0とEQ0をつなくTS

~~~中略~~~

CONNECTION : 1 - 0 EQ1とEQ0をつなくTS

~~~中略~~~

CONNECTION : 0 - DC EQ0とDCをつなくTS (どのようなDCかは、  
対応するT<sub>S</sub>n.log参照)

~~~中略~~~

CONNECTION : 0 - ?? EQ0と??をつなくTS (??が何であるかは、T_Sm.log参照)

TS n .log

INITIAL STRUCTURE

| | | | |
|---|-----------------|-----------------|-----------------|
| H | 0.299046126297 | 0.824914186341 | -1.543088134585 |
| O | -0.527191800919 | 0.602385717426 | -1.071167510316 |
| O | -0.483843412292 | -1.274397964889 | 0.264284928724 |
| C | -0.391162088155 | -0.064922267476 | 0.144548168047 |
| H | -0.276089959676 | 0.619520579434 | 0.994380478018 |

~~~中略~~~

IRC FOLLOWING (FORWARD) STARTING FROM FIRST-ORDER SADDLE

~~~中略~~~

IRC FOLLOWING ALONG BACKWARD DIRECTION

~~~中略~~~

- *Forward*と*Backward*のどちらが生成物または反応物かはわからない
- *Forward*および*Backward*それぞれの最後の構造はEQ、DC、または、??
- *TS\_list.log*でコネクションがDCまたは??だった場合は、*TSm.log*の*Forward*または*Backward*の最終構造を見て対応する構造を確認
- ?? :最後のEQ最適化に失敗、到達した構造が虚数振動数を持っていた

# 並列計算オプション

- 次を併用可能

① × ② のコア数が最大で消費される

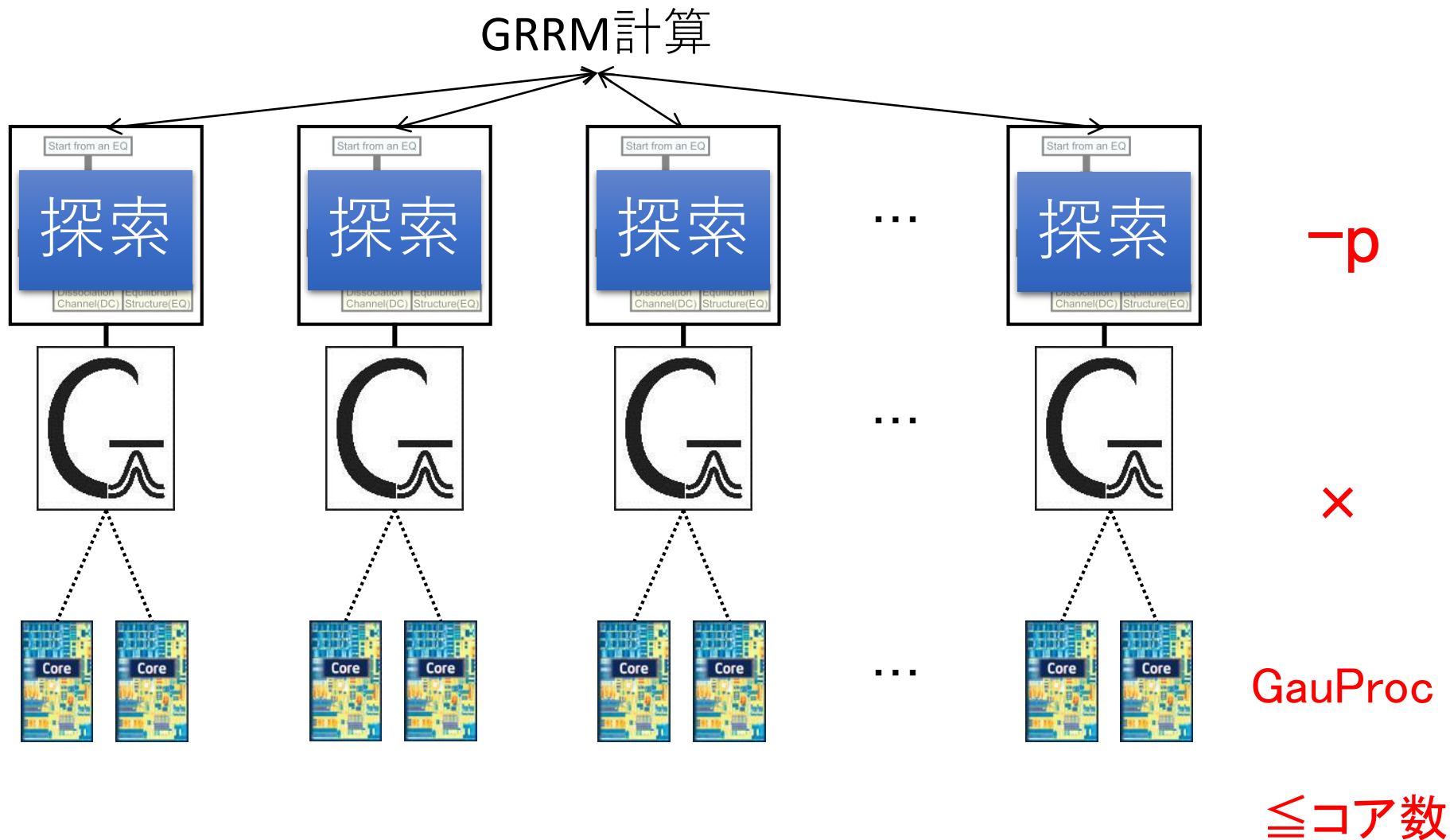
① \$ GRRMp -p[*n*]

➤ GRRMの作業の並列処理数

② Options下のGauProc=[*m*]

➤ Gaussian計算の並列数(%NProcShared)

# GRRM14の並列処理



# GRRM-GDSPの入手方法

<http://iqce.jp/GRRM-T>

## GRRM-GDSP

GRRM-GDSPは、GRRMプログラムの探索結果を可視化するツール  
最新版(2017年6月改訂)の説明書とファイル一式が、以下のリンクから、

[GRRM-GDSP説明書\(PDF\) \(879 KB\)](#)

[GRRM-GDSP \(ファイル一式\) \(Zip\) \(779 KB\)](#)

インストール手順を参照

Perl、graphviz、gnuplotも入れておく

|                          |                      |
|--------------------------|----------------------|
| <b>GRRM_GDSP.pl</b>      | GRRM-GDSP 実行ファイル本体   |
| <b>formDC.exe</b>        | 解離経路解析用補助プログラム       |
| <b>grrMap.pl</b>         | 反応経路網 Map 作成プログラム    |
| <b>TsDisp.pl</b>         | TS 前後表示作成プログラム       |
| <b>TS_enp.txt</b>        | TS エネルギーMap 作成補助ファイル |
| <b>GDSP.HTM</b>          | Web 表示起動ファイル         |
| <b>GDSP_0.HTM</b>        | Web 表示リストひな形ファイル     |
| <b>GDSP_out.HTM</b>      | Web 表示リスト初期画面ファイル    |
| <b>XXn_0.HTM</b>         | 構造表示ひな形ファイル          |
| <b>XXna_0.HTM</b>        | 動画表示ひな形ファイル          |
| <b>0_0.HTM</b>           | 空表示ファイル              |
| <b>anime.js</b>          | 動画表示ツール              |
| <b>GLmol.js</b>          | 分子構造表示ツール            |
| <b>jquery-1.7.min.js</b> | 分子構造表示ツール            |
| <b>Three49custom.js</b>  | 分子構造表示ツール            |

\$GRRMroot/GDSP/ 以下に置く



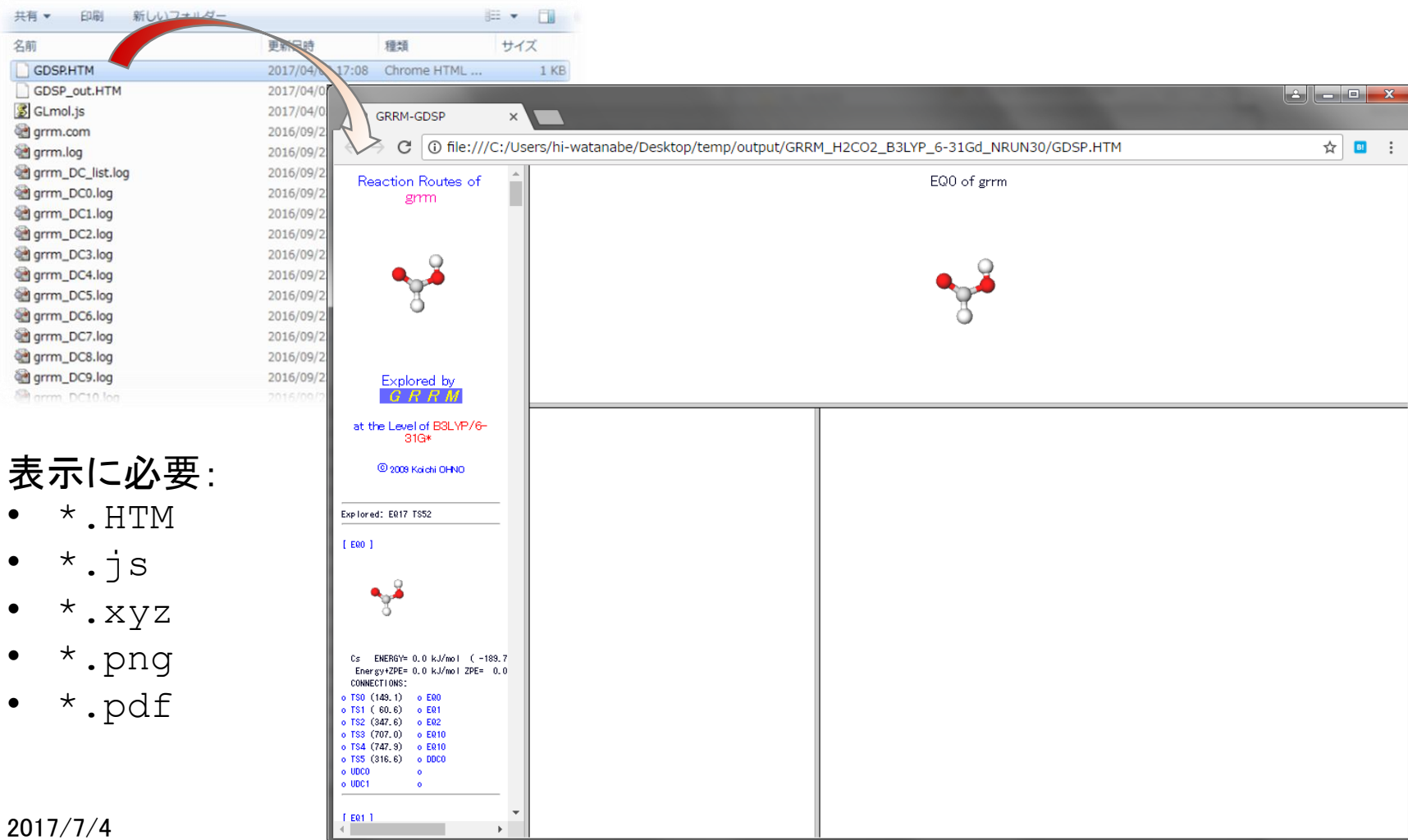
# GRRM-GDSPの起動方法

```
$ GRRM_GDSP_-Cfile=インプット名
```

- インプット名から「.com」を除去すること

# GRRM-GDSP解析結果の閲覧

- GDSP.HTMをWebブラウザで開く



The image shows a Windows file explorer window on the left with a list of files including GDSPTHM, GDSP\_out.HTM, GLmol.js, grrm.com, grrm.log, and various grrm\_DC\*.log files. A red arrow points from the GDSPTHM file to a web browser window on the right. The browser window displays the GRRM-GDSP analysis results for the reaction routes of grrm. The main content area shows the EQ0 of grrm with a ball-and-stick model of the molecule. The left sidebar of the browser window contains the following text:

Reaction Routes of  
grrm

Explored by  
**GRRM**

at the Level of B3LYP/6-31G\*

© 2008 Kaichi OHNO

Explored: E017 TS52

[ E00 ]

Cs ENERGY= 0.0 kJ/mol ( -189.7  
Energy+ZPE= 0.0 kJ/mol ZPE= 0.0  
CONNECTIONS:

|               |        |
|---------------|--------|
| o TS0 (149.1) | o E00  |
| o TS1 ( 60.6) | o E01  |
| o TS2 (947.6) | o E02  |
| o TS3 (707.0) | o E010 |
| o TS4 (747.9) | o E010 |
| o TS5 (316.6) | o DDC0 |
| o UDC0        | o      |
| o UDC1        | o      |

[ E01 ]

表示に必要:

- \* .HTM
- \* .js
- \* .xyz
- \* .png
- \* .pdf