GRRM17

GRRMの紹介

GRRM は量子化学の予言性を利用して未知の化学を自動的に探索する世界初のプログラムです。
2002年に東北大学の大野公一教授と修士1年の前田理さん(現北海道大学教授)により開発が開始、
2009年には世界でも有数の理論化学者である諸熊奎治博士も参入され、従来不可能とされたことを次々と実現しております。
そして、現在も進化を続けている純国産の先端技術です。

今回導入されたGRRM17はGRRM11, GRRM14に続くバージョンとなっています。

さらなる詳細については量子化学探索研究所のページ https://iqce.jp/GRRM/ をご覧下さい。
(論文等での発表時に引用する場合は英語ページ https://iqce.jp/GRRM/index_e.shtml の方を引用ください)

マニュアルについて

ユーザーマニュアルは北海道大学のサイトに用意されています。(PDF 版のマニュアルは存在しません)
https://afir.sci.hokudai.ac.jp/documents/manual/54
インプットの詳細や MPI での利用方法、Molpro や GAMESS、Turbomole や SIESTA
との連携の方法ついても情報があります。
チュートリアルも用意されていますが、そちらを利用するためには別途ユーザー登録が必要となります。

センター側で用意しているサンプルは今のところ Gaussian (g09/g16)用のみとなっています。
なお、Gaussian については g09 と g16 の両方が利用可能です(一応 g09 を推奨としておきます)。

GRRM14 から少し変わっている部分もあると思われますので、移行の際にはご注意ください。
(例: GRRM17 で実行する場合には GRRM キーワードのかわりに ADDF キーワードを使う必要があります)

サンプルジョブ

/local/apl/lx/GRRM17/samples 以下にいくつかサンプルがあります。
ADDF のサンプルは完了までにそれなりの時間を要しますので実行される際にはご注意下さい。

Gaussian を使った SC-AFIR 計算のセンター固有の問題について

2022/2/7 の更新によって問題は解消しました。

成果を発表する際の引用について

下記のページに情報がまとめられておりますので適切に引用するようお願いいたします。
https://afir.sci.hokudai.ac.jp/documents/manual/52