

# Gaussian09 GaussView5 Electronic Structure Program

コンフレックス株式会社  
〒141-0021

東京都品川区上大崎2-15-19  
アイオス目黒駅前ビル6F

TEL : 03-6380-8290

FAX : 03-6380-8299

Email : info@conflex.co.jp

http://www.conflex.co.jp/

## Conflex USA

12526 High Bluff Drive, Suite 300

San Diego, CA 92130 USA

TEL: +1-760-930-9277

USA: 1-800-298-0054

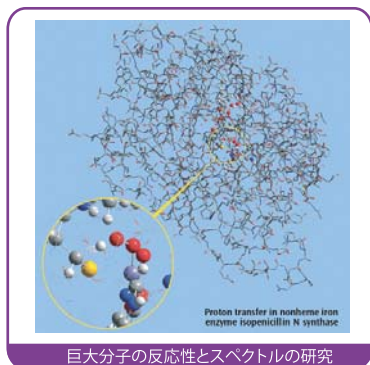
FAX: +1-509-692-4541

Email: info@conflex.us

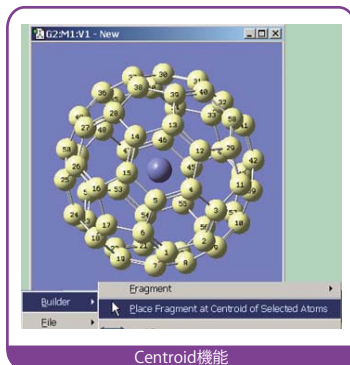
http://www.conflex.us

Gaussian09は、電子構造プログラムGaussianシリーズの最新版です。Gaussian09は、化学・化学エンジニア・生化学・物理化学などの分野に加え、化学的性質に興味のある新しいエリアの研究者たちにも広く使われています。

量子化学の基本的法則を基にし、分子構造・様々な分子特性・エネルギー・系の振動数などを予測できます。適用範囲は、安定構造だけでなく短寿命中間体・遷移状態構造といった実験的に観測困難もしくは不可能な化合物まで広がっています。それにより、広範囲な条件下での分子や反応の研究に用いる事が可能になっています。



巨大分子の反応性とスペクトルの研究



Centroid機能

## Gaussian09新機能

### ONIOMを使用した巨大系の反応モデリング

ONIOMは、MO:MM計算において「electronic embedding」機能を持っています。それによって、MM領域の静電特性がQM領域の計算時に取り入れられます。また、高速で信頼性のある最適化アルゴリズムを持っています。各モデル系内での原子間カップリングを取り入れ、特にMM層ではmicro-iterationを全体のリアル系の最適化ステップの間に行っています。

- ◆ 遷移状態の構造最適化
- ◆ より高速なIRC計算
- ◆ 「electronic embedding」を含んだ振動計算
- ◆ 溶媒中での計算
- ◆ 実行速度の向上
- ◆ 全体にわたってカスタマイズできるMM力場
- ◆ 正確な解析的勾配と振動数による、新たなAM1, PM3, PM3MM, PM6, PDDG半経験的方法の実装 (パラメータは全てカスタマイズ可能)

### 気相および溶媒中での励起状態の研究

励起状態系や反応とその過程を研究するための、以下の機能が追加されました。

- ◆ 解析的な時間依存DFT (TD-DFT) 勾配
- ◆ EOM-CCSD法
- ◆ 状態固有の溶媒和励起および低準位への遷移
- ◆ Franck-Condon and Herzberg-Teller解析 (FCHT)
- ◆ 溶媒中 (平衡および非平衡) でのCISおよびTD-DFT計算の完全対応

## Gaussianの概要

力場計算から半経験的分子軌道計算まで行うことができる、最新の手法とアルゴリズムを取り入れた代表的量子化学計算プログラム

- 広範囲にわたる手法
  - ・ AM1、HF、各種DFT、MP2、CCSD(T)、CASCF、G2、CBS等
- 基底状態、励起状態及び遷移状態の構造とエネルギー
- レイヤーごとに異なる計算手法を用いるONIOM法
- 化学反応の経路探索
- 溶媒効果
- 分子軌道
- 分子特性
  - ・ 多重極モーメント、分極率、超分極率
  - ・ 円偏光二色性強度
  - ・ 基準振動、IR及びRamanスペクトル
  - ・ NMR遮蔽及び磁化率
  - ・ 静電ポテンシャル、電子密度
  - ・ 紫外可視光吸収スペクトル
- 熱化学解析
  - ・ エンタルピー、エントロピー、熱容量

## Gaussian09、GaussView5 動作環境

### Windows

CPU : Intel Pentium4, Celeron, Xeon,  
AMD Athlon, AMD Phenom II

OS : Windows XP, Vista  
Server 2003

メモリ : 1GB 以上

ディスクスペース : 700MB以上  
CDROM、Mouse

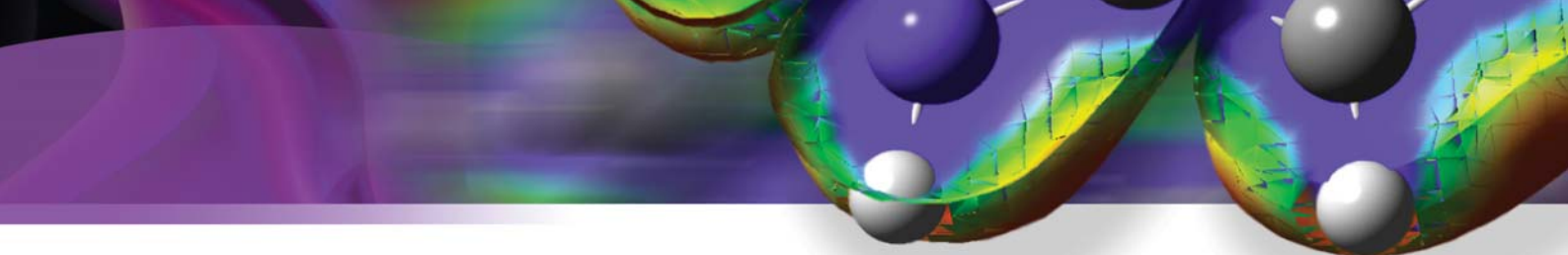
### Mac

CPU : Mac G4, G5, Intel

OS : Mac OS X 10.4.11 以降

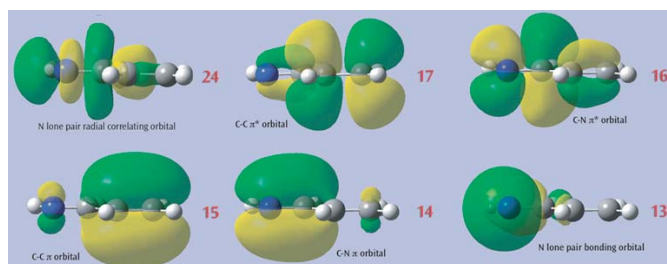
メモリ : 1GB 以上

ディスクスペース : 700MB以上  
CDROM、Mouse



## その他の新機能

- ◆ 溶媒と機能の大幅な強化：  
先の励起状態系での機能に加え、SCRFに新しい機能が実装されています。  
形式的な連続平面電荷により、反応場の連続性、平滑性および堅牢性を保証します。また、原子の位置と外部摂動場に関する微分の連続性も保証されます。この結果、溶媒中での高速でより信頼性の高い（気相と変わらないステップ数での）構造最適化と正確な振動数計算が可能になります。
- ◆ 操作性の向上：  
より多くの計算タイプが、信頼性よく再計算可能に。分子中のフラグメント定義、型による原子の固定、フラグメント定義、ONIOMの層や残基、振動数計算での注目する基準振動の選択や並べ替え、post-SCF強度の保存と読み込み、基準振動の保存
- ◆ 追加のスペクトル予測機能：  
DFTによる解析的な一次超分極率と数値的な二次超分極率、解析的な静的および動的Raman強度、解析的な動的ROA強度、改良非調和振動数計算。
- ◆ Brueckner Doubles (BD) 法による解析的勾配
- ◆ 個々の軌道のポピュレーション解析
- ◆ フラグメントに基づいた、初期guessとポピュレーション解析
- ◆ 多くのDFTの新機能：  
長距離補正、経験的分散およびdouble hybrid汎関数
- ◆ 大幅な速度の向上：  
大きな分子の構造最適化が高速化され、振動数計算が並列で16倍、IRC計算で3倍、旋光度計算で2倍の向上。



GaussView5はGaussian09の全機能を使用できるGUIです。最新の3D構造ビルダーを用いて分子を構築したり、他の標準的なファイル形式から分子の座標を読み込み、Gaussian09のジョブをセットして計算を実行したり、計算状況を見ることが出来ます。

## GaussView5新機能

### 分子構造の分析

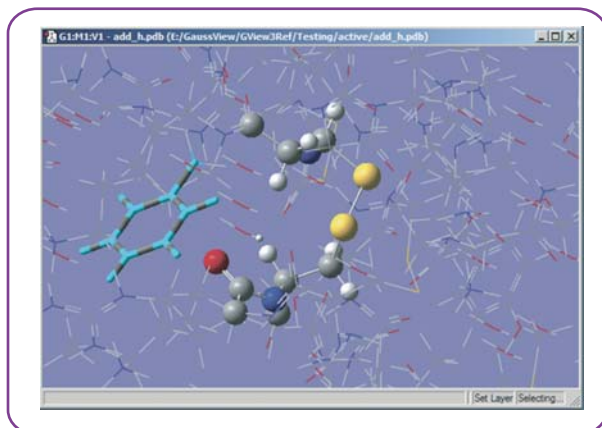
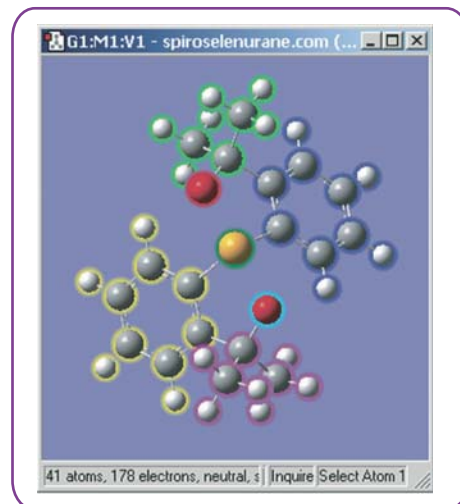
- ◆ マルチビューモードで、表示のレイアウトを設定可能
- ◆ 原子のハイライト表示の持続

### 分子の構築・修正

- ◆ 選択した複数の原子の重心に原子やフラグメントを配置するCentroid機能の追加

### ジョブの設定機能

- ◆ ONIOMのレイヤーをPDBファイルの2次構造で指定可能
- ◆ フラグメント単位で、電荷とスピン多重度が指定可能
- ◆ 分子の記述にPDBデータを含めることが可能
- ◆ NMRのスピン-スピンカップリングの原子の指定



### 計算の実行

- ◆ マルチCPUとクラスター／ネットワークの並列ジョブの設定
- ◆ フラグメント単位で電荷とスピン多重度が設定されているFragment guessとcounterpoiseの入力を自動的に設定

### 計算結果の表示

- ◆ 振動表示させるモードの集合を選択可能
- ◆ 計算された基準振動モードをcheckpointファイルに保存可能
- ◆ 振動解析あるいは基準振動解析の表示で、代わりに同位体を設定
- ◆ アニメーションをMNGフォーマットで保存可能