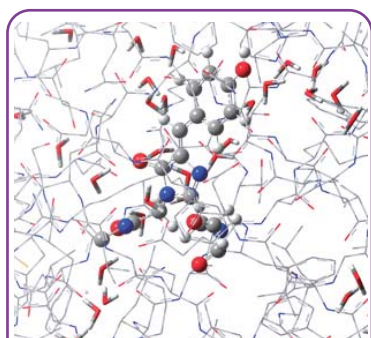


# Gaussian16

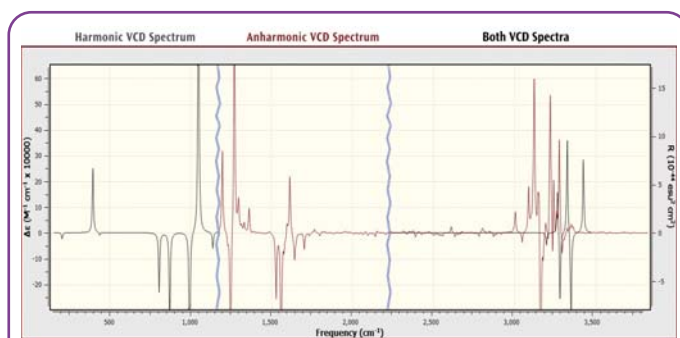
## Electronic Structure Program

Gaussian16は、電子構造プログラムGaussianシリーズの最新版です。Gaussian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。



ONIOM (TD B3LYP : Amber)



非調和振動解析 (Anharmonic Frequency Analysis)

### Gaussian16新機能

#### 新しいモデリング性能

- ◆ TD-DFT解析的二次微分: 励起状態の振動数 / IR、ラマンスペクトル、遷移状態構造の最適化とIRC
- ◆ 励起状態構造最適化のためのEOMCC解析的勾配計算
- ◆ VCDおよびROAスペクトルへの非調和振動解析
- ◆ 振電スペクトルとその強度の計算機能
- ◆ 共鳴ラマンスペクトル計算
- ◆ 新規DFT汎関数: M08, MN15
- ◆ 新規double-hybrid法: DSDPBEP86, PBE0DH, PBEQIDH
- ◆ Adamoによる励起状態電荷移動診断法
- ◆ CaricatoによるEOMCC溶媒和相互作用モデル

#### 計算性能の強化

- ◆ Linux環境で、GPUのNVIDIA K40, K80及びP100 (Rev.B以降)を使ったHartree-Fock, DFT計算が可能
- ◆ 多数のプロセッサ上での並列性能が向上
- ◆ CCSD繰り返し計算時のI/Oを避けるための最適化されたメモリアルゴリズム
- ◆ GEDIIS最適化アルゴリズムの性能を強化
- ◆ アクティブスペースが(10,10)以上のCASSCF計算の改良 (最大16軌道)
- ◆ W1化合物モデルの内殻関連エネルギー計算の大幅な速度向上
- ◆ CEP法の対角二次自己エネルギー近似 (D2)項の計算の大幅な速度向上

#### 使用法の強化

- ◆ FortranやCのようなコンパイラ言語や、PythonやPerlのようなインタープリター型言語で書かれたプログラムと、Gaussianとのインターフェイスを担うツールが用意されています。
- ◆ 入力ファイルのLink 0 (%) やDefault.Routeファイルに設定していた変数を、コマンドラインの引数で指定したり環境変数で指定することが可能になりました。
- ◆ 構造最適化計算で、力の定数を最適化のnステップ毎に計算するように設定できます。

コンフレックス株式会社  
〒108-0074  
東京都港区高輪3-23-17  
品川センタービルディング6F

TEL : 03-6380-8290  
FAX : 03-6380-8299  
Email : info@conflex.co.jp  
http://www.conflex.co.jp/

### 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  
PM7, HF, 各種DFT, MP2, CCSD(T), CASSCF, G2, CBS等
- 基底状態、励起状態およ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
  - ・IR、Raman、CDスペクトル
  - ・NMR遮蔽および磁化率
  - ・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

### Gaussian16の動作環境

#### Windows

7, 8, 8.1, 10,  
Server 2012 R2

#### Mac

macOS Intel  
10.6.8, 10.7.5, 10.8.5, 10.9.5,  
10.10.5, 10.11.6, 10.12.6,  
10.13.1

#### Linux

[http://gaussian.com/g16/g16\\_plat.pdf](http://gaussian.com/g16/g16_plat.pdf)

メモリー: 1~2 GB  
ディスク: 2~4 GB

  
HIGH PERFORMANCE  
Conformation Analysis

# GaussView 6

GaussView 6は、Gaussian 16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、Gaussian形式のファイルだけではなく、他の標準的形式の分子ファイルを読み込みGaussian 16のジョブを設定して実行できます。またそれらの計算状況および結果を見ることができます。

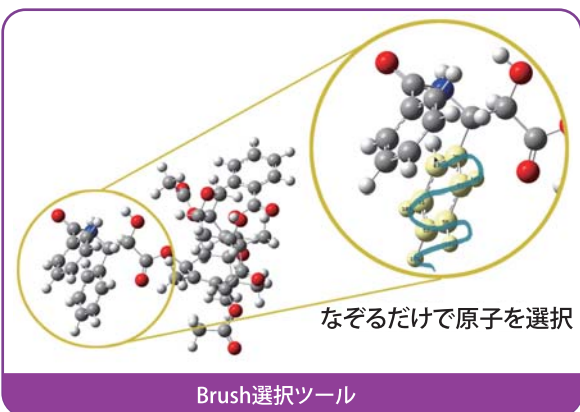
## GaussView6新機能

### 結果の可視化

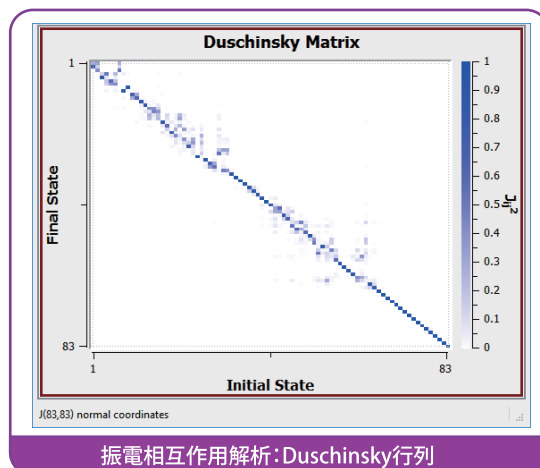
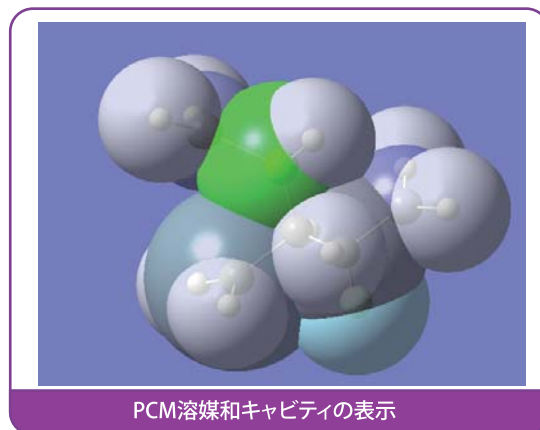
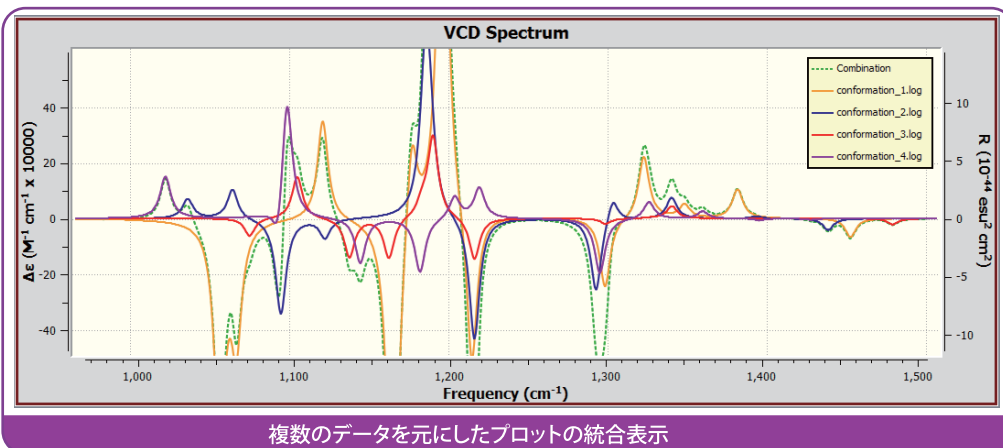
- ◆ **非調和振動解析**  
IR, Raman, VCDおよびROAスペクトルの調和および非調和振動解析の結果を表示することが可能です。
- ◆ **PCM溶媒和キャビティの表示**  
SCRF計算に用いる溶媒和キャビティを表示することが可能です。
- ◆ **旋光分散(ORD)**  
旋光分散計算の結果をプロットできるようになりました。
- ◆ **振電スペクトル**  
振電スペクトルとDuschinsky行列を含む、振電相互作用解析結果の表示を新たに可能にしました。
- ◆ **計算結果の概要表示の強化**  
計算結果の概要を広範囲に見ることができるようになりました。
- ◆ **動画の保存**  
通常モードのアニメーションや基準振動モードの動画をMP4形式のビデオファイルで保存できます。
- ◆ **プロットの結合**  
複数のデータを元にそれらを統合したプロットを表示することができます。

### 計算ジョブのセットアップ機能

- ◆ **複数ジョブの一段階でのセットアップ**  
グループ内の複数の分子に対するGaussianのジョブを、いくつかの操作を加えるだけでまとめて設定することが可能です。
- ◆ **GMMX配座探索**  
追加モジュールを用いて配座探索を実行することが可能になりました。



- ◆ **SCジョブ管理**  
ローカルコンピュータのためのキューイングシステムであるSCジョブマネージャーが、組み込まれました。
- ◆ **対称性**  
点群対称性機能で、選択している分子の対称性を上げることが可能です。
- ◆ **Brush選択ツール**  
原子が多過ぎて個別に選択するのが非効率であったりうまく選択できない、密集したクラスター中の原子を素早く選択するのに有用です。
- ◆ **ジョブセットアップ新機能**  
Gaussian Calculation Setupダイアログには多くの新機能が追加されました。



## GaussView6動作環境

- x86-64 Linux
- IA32 Linux
- 64 bit macOS
- 64 bit Windows
- 32 bit Windows