



Gaussian

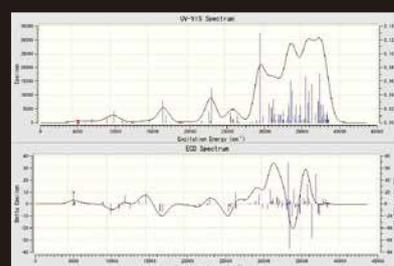
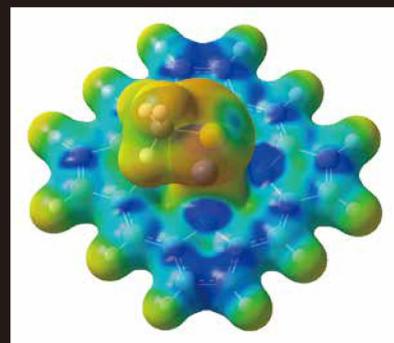
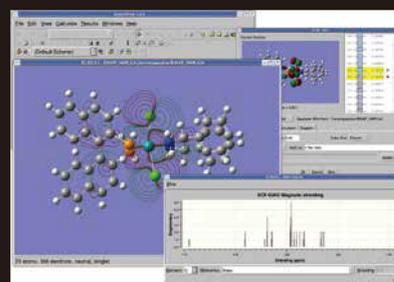
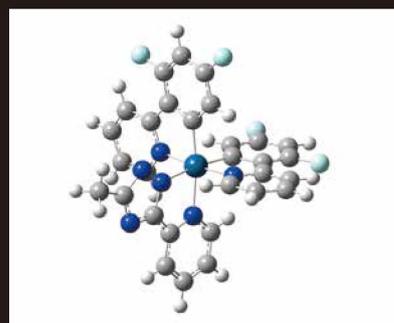
量子化学計算のデファクトスタンダード

Gaussianは、多種多様な分子・化学反応を解析・設計するための量子化学計算ソフトウェアです。最も有名で利用者数の多い量子化学計算ソフトウェアで、分子設計・構造解析・化学反応解析などで多大な成果をもたらしています。Gaussianは、様々な半経験的・非経験的量子化学計算法に関する機能を有し、簡易的から高精度な計算まで対応しています。また、分子構造・基準振動などの基礎物性や、NMR化学シフトや紫外・可視吸収スペクトルなどの分子の同定や材料設計に役立つ物性値などを算出することが可能です。さらに、遷移状態探索や反応座標計算などの機能が用意されていますので、化学反応の解析・評価にも威力を発揮します。

豊富な機能と使いやすい グラフィカルユーザーインターフェース

GaussViewは、Gaussianのグラフィカルユーザーインターフェースです。マウス操作や簡単なキーワード・数値入力により、分子構造の構築から、計算設定、ジョブの投入・管理、ならびに計算結果の可視化・解析まで行うことができます。構造構築機能は、有限系から周期境界モデル(1~3次元)まで対応し、分子フラグメントや構造テンプレートを用いて、分子構造やクラスタ構造を簡単に作成できます。また、結果の可視化では各種スペクトルなどのグラフ表示や分子軌道などの等値面・等高線表示などが行え、計算結果を容易に確認することができます。

量子化学計算ソフトウェア



量子化学計算ソフトウェア

●計算方法

●構造予測・反応解析

●プロパティ計算

グラフィカルユーザーインターフェース

●構造構築機能

●表示機能

●計算設定・ジョブ管理機能

●サポートプラットフォーム



Gaussian

- ・分子力学法: AMBER, DREIDING, UFF
- ・原子価結合法: GVB-PP
- ・半経験的分子軌道法: CNDO, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO, PM3MM, PDDG, PM6, PM7
- ・Hartree-Fock法: RHF, UHF, ROHF
- ・配置間相互作用法: CIS, CID, CISD, QCISD
- ・Møller-Plesset摂動法: MP2, MP3, MP4, MP5
- ・クラスター展開法: CCD, CCSD, EOM-CCSD, SAC-CI
- ・多配置SCF法: CASSCF, RASSCF
- ・密度汎関数法: LDA, (meta-)GGA (BVP86, PBPBE, BLYP, TPSS, etc.), Hybrid (B3LYP, B3PW91, mPW1PW91, PBE1PBE, M06, HSEh1PBE, etc.), LC (LC-wPBE, CAM-B3LYP, wB97X, etc.), Double Hybrid (B2PLYP, mPW2PLYP, etc.), Empirical Dispersion Scalar (DKH 2nd order, DKH 0th order, RESC), Spin-Orbit (DKH 4th order)
- ・Onsager, PCM, IPCM, SCI-PCM, State-Specific PCM, SMD, PTED
- ・点電荷・静電場(多重極子), Fermi contact perturbation
- ・量子分子動力学法: BOMD, ADMP
- ・QM/MM: ONIOM
- ・周期境界条件: 1~3次元

- ・構造最適化計算: EF, GDIIS, GEDIIS, RFO, Newton-Raphson, steepest-descent
- ・遷移状態探索: EF, GDIIS, STQN, QST
- ・反応経路: Scan, IRC

- ・熱力学物性: エンタルピー、エントロピー、自由エネルギー、モル比熱など
- ・IRスペクトル、ラマンスペクトル(非共鳴、前期共鳴)
- ・紫外・可視吸収スペクトルとその微細構造 (Franck-Condon項, Franck-Condon Herzberg-Teller項)
- ・円二色性スペクトル(VCD, ECD)
- ・旋光分散スペクトル(ORD)、旋光度
- ・NMR: 化学シフト、スピン-スピンカップリング、磁化率
- ・ESR: gテンソル, hyperfine coupling constants
- ・多重極子モーメント
- ・電気陰性度、イオン化ポテンシャル
- ・(周波数依存)分極率・超分極率(1次、2次)
- ・振動-回転カップリング
- ・原子電荷: Mulliken, ESP

GaussView

- ・環構造・グループなどのフラグメントを用いた構造構築
- ・分子および部分構造のミラー反転
- ・対称性の検索と設定
- ・1~3次元周期構造構築
- ・複数の分子構造を含むSDFおよびMOL2ファイルフォーマットへの対応

- ・エネルギー準位図の表示
- ・3次元データの等値面・等高線表示: 分子軌道、電荷密度、静電ポテンシャルなど
- ・各種スペクトルのグラフ表示: IR、ラマン、NMR、UV/Vis、VCD、ECD、ROA
- ・分子振動準位を考慮した各種スペクトル、およびDuschinsky行列の表示
- ・アニメーション表示とGIFアニメーションファイルへの出力: 構造最適化計算、基準振動解析、IRC計算、量子MD計算など
- ・2変数スキャン計算の3次元ポテンシャル曲面表示
- ・SCRF計算の溶媒和空隙の表示
- ・原子の立体化学情報(R, S)の表示

- ・計算方法、基底関数、プロパティなどの計算設定
- ・周期境界条件を使った計算設定
- ・ONIOMモデルのための計算設定
- ・CASSCF計算のための分子軌道選択と計算設定
- ・計算ジョブの投入・管理
- ・マルチジョブの一括設定
- ・GMMXアドオンツールを用いた配座探索
- ・SCジョブマネージャーによるジョブキュー管理

- ・Windows/Linux/Unix/Mac

●記載の商品名は各社の商標または登録商標です。

●本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。

(2018.06)



Gaussian社 日本代理店

株式会社モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀

Tel: 03-3553-8030 Fax: 03-3553-8031

E-mail: sales@molsis.co.jp <https://www.molsis.co.jp/>