

Molpro

効率的な電子相関の取り扱い

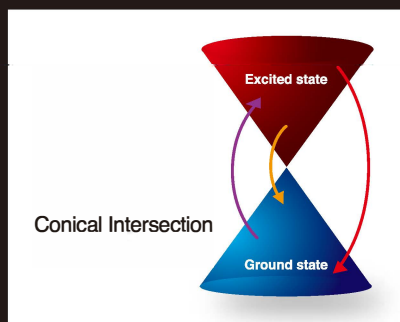
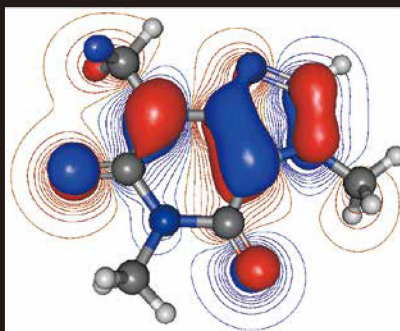
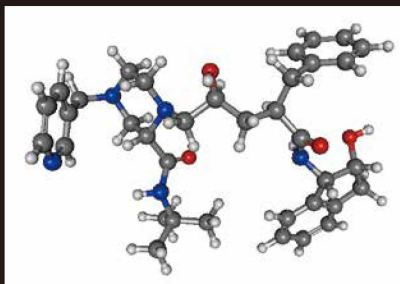
Molproは、Werner教授(ドイツStuttgart大学)とKnowles教授(イギリスCardiff大学)を中心に開発された非経験的分子軌道計算ソフトウェアで、電子相関の正確かつ効率的な取り扱いに特長があります。Molproは、配置間相互作用法、クラスター展開法、多配置SCF法、多配置参照摂動法など電子相関の取り扱いに関する様々な計算機能を搭載しています。通常これらの方法は、分子サイズに対する計算コストが急激に増大するため小さな分子にのみ適用されてきましたが、Molproではintegral-direct local electron correlation methodsを採用し、より大きな分子を取り扱うことができます。

高精度な励起状態計算

多配置波動関数を用いた計算手法に強みを持つMolproは、励起状態の取り扱いに優れたソフトウェアであるといえます。正確な励起状態波動関数を計算できますので、励起エネルギーの見積もりや状態間の円錐交差(コニカルインターセクション)の探索など、励起状態の研究に適しています。

1) M. Schutz, Mol. Phys., **96**, 719 (1999).

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

●解析機能

●サポートプラットフォーム



Molpro

・原子価結合法: CASVB
・Hartree-Fock法: RHF, UHF, ROHF, DF-HF
・配置間相互作用法: CISD(T), QCISD(T), LQCISD(T), DF-LQCISD(T), FullCI
・Møller-Plesset摂動法: MP2, MP3, MP4, LMP4, DF-LMP4, DF-LMP2-F12, DF-LMP2-R12, etc.
・クラスター展開法: CCSD(T), BCCD, LCCSD(T), DF-LCCSD(T), EOM-CCSD, CCSD(T)-F12, DCSD, etc.
・多配置SCF法: CASSCF, RASSCF
・多参照CI法: MRCI
・多参照摂動法: MRPT2, MRPT3
・多配置参照摂動法: CIPT2
・振動摂動法: VPT2
・振動多参照法: VMSCF, VMRCI
・密度汎関数法: LDA, GGA(Beck88, PW91, PBE, etc.), Hybrid(B3LYP, BHHLYP, etc.)
・Wavefunction-in-DFT法: WFinDFT
・相対論効果: Scalar (DKH, Cowan-Griffin correction), Spin-Orbit (BP operator), ECP
・溶媒効果: COSMO
・外場の設定: 点電荷、静電場

・構造最適化計算: Rotational Function, GDII, Quadratic Steepest Descent, Augmented Hessian
・遷移状態探索: Rotational Function, GDII, Quadratic Steepest Descent
・反応経路: QSDPATH

・熱力学物性: エンタルピー、エントロピー、分配関数、モル比熱など
・IRスペクトル、ラマン散乱活性
・光電子(吸収、蛍光)スペクトル(Frank-Condon項)
・NMR: 化学シフト、磁化率、回転gテンソル
・多重極子モーメント
・励起エネルギーと強度
・NBO解析、NPA解析、IBO解析

・MCSCF波動関数を用いたnon-adiabatic coupling matrix elements¹⁾の算出
・CASSCF波動関数を用いた原子価軌道解析
・MCSCF/MRCI波動関数を用いた一電子遷移特性
・MCSCF波動関数を用いた二電子遷移特性
・局在化軌道の出力
・Distributed Multipole Analysis²⁾による密度行列解析
・非調和項を考慮した振動解析
・多次元ポテンシャルエネルギー曲面の基準座標の変換
・反応データベース機能

・Linux/Unix/Mac

1) H. J. Werner, B. Follmeg, and M. H. Alexander, J. Chem. Phys. **89**, 3139 (1988).
T. Pacher, L. S. Cederbaum, and H. Koppel, J. Chem. Phys. **89**, 7367 (1988).
2) A. J. Stone, Chem. Phys. Letters **83**, 233 (1981).

●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)



Technologie-Transfer-Initiative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/>