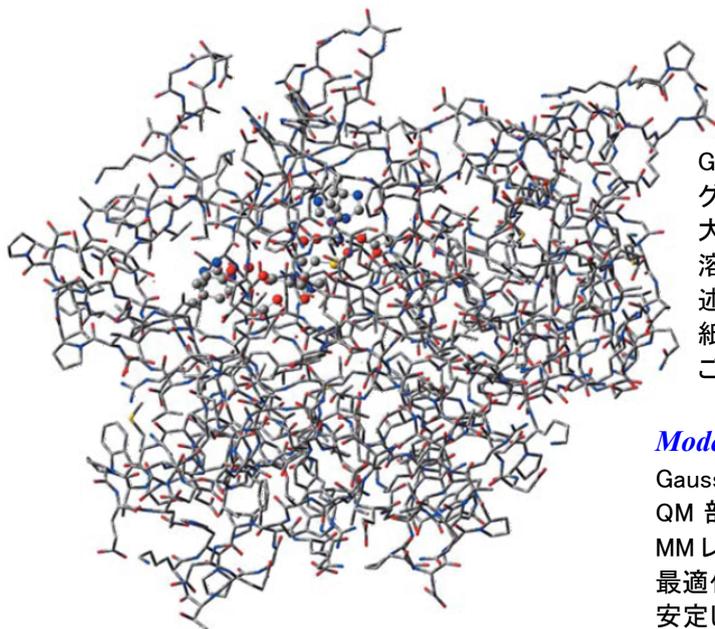


A first look at

Gaussian 09



New Features, New Chemistry

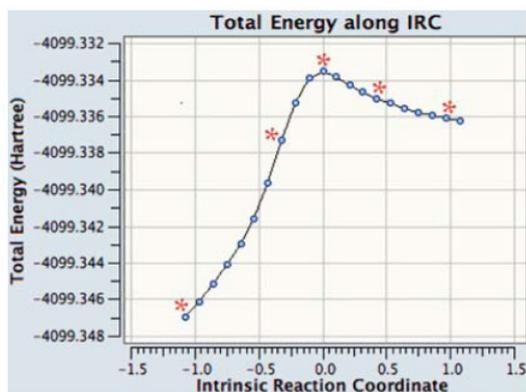
Gaussian 09 では、より大きな分子系に対するモデリングを実現するため、ONIOM 法に関する機能の追加や大幅なパフォーマンスの改善が行われました。また、溶媒効果など、より広範な現実の環境をより正確に記述できるように、多くの新機能が追加されています。本紙面では、Gaussian 09 のいくつかの新機能についてご紹介します。

Model Reactions of Very Large Systems with ONIOM

Gaussian に搭載されている ONIOM は、MO:MM 計算時に QM 部分の計算中に MM 部分の静電的効果の取り込み、MM レイヤーに属する原子とのカップリングを考慮した構造最適化、MM レイヤーでの microiteration を駆使した高速で安定した最適化アルゴリズムなど、様々な機能を持ちます。Gaussian 09 では、以下の機能を含め、ONIOM の機能に関する多くの追加機能・改良が搭載されています。

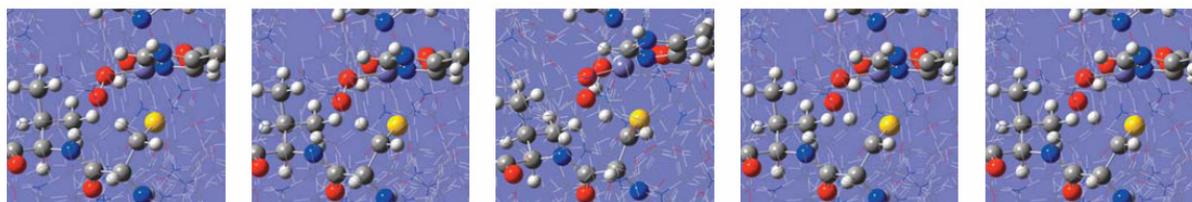
非ヘム鉄を持つ酵素 *isopenicillin N synthase (IPNS)* は 5368 原子(図では水素を非表示)で構成されます。基礎的な生化学プロセスにおける重要な触媒として典型的な酵素です。この分子のモデリングにおいては、タンパク質マトリクスと金属中心がそれぞれどのように酵素系の触媒活性に寄与しているかが解明されています。Reference: M. Lundberg, T. Kawatsu, T. Vreven, M.J. Frisch and K. Morokuma, *JCTC* 5 (2009) 222.

- ◆ 遷移状態構造最適化
- ◆ 高速な IRC 計算
- ◆ MM 電荷存在下での振動計算
- ◆ 溶媒中の計算
- ◆ パフォーマンスの向上
- ◆ カスタマイズ可能な MM 力場
- ◆ 解析微分と振動計算を含めた AM1、PM3、PM3MM、PM6、PDDG 半経験的方法(パラメータはカスタマイズ可能)



IRC Energy Plot QM 部分の 2 次のカップリングを MM 部分に厳密に取り入れた macro/micro 繰り返し最適化法の特性を生かし、この反応の遷移状態構造の最適化に Gaussian 09 の ONIOM 機能を用いています。最適化された遷移状態構造は振動計算によって確認され、左図のプロットに示す反応パスを計算するための IRC 計算の初期値構造として使われました。

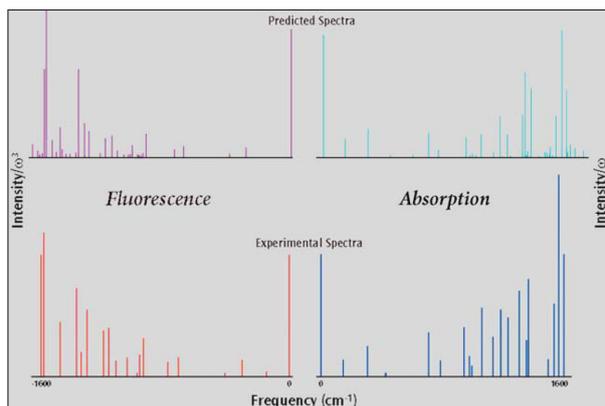
IRC 計算で得られた構造 (左から右へ)エネルギープロット上の対応する各点は*で印されています。中央の構造が遷移状態構造です。反応過程において、図中黄色で表される硫黄原子付近でのプロトン移動が見られます。GaussView5 を使い、これらのイメージは IRC 結果のアニメーションのフレームとして作成されます。



Study Excited States in the Gas Phase and in Solution

励起状態計算に関する以下の新機能が追加されました。

- ◆ Time-Dependent DFT (TD-DFT)法における解析的エネルギー微分
- ◆ EOM-CCSD 法
- ◆ State-specific (SS)モデルに基づく溶媒効果を考慮した吸収・発光スペクトルの計算
- ◆ 電子状態間の遷移に伴って生じる振動状態間の遷移確率の計算:
Franck-Condon (FC)項、Herzberg-Teller (HT)項、Franck-Condon Herzberg-Teller (FCHT)項
- ◆ CIS 法と TD-DFT 法に対する溶媒効果を考慮した計算機能のフルサポート
(平衡・非平衡溶媒和の両方に対応)



Comparing predicted and experimental spectra of the Q_x band of porphyrin.

左図は、ポルフィリンの吸収・発光バンドの計算値(上)と実験値(下)を比較したものです。実験値は、振動状態間の遷移を確認できるように、高解像度の分光器で測定されたものです。計算値は、励起状態の計算に PBE1PBE 汎関数を用いた TD-DFT 法が使用され、振動状態間の遷移確率の計算に Franck-Condon Herzberg-Teller (FCHT)法が使用されています。なお、計算で得られた振動数には、調和近似に対する補正として、0.95 のスケール因子が使用されています。Gaussian 09 の新機能により、振動状態間の遷移を考慮した吸収・発光スペクトルの計算が可能です。Reference: F. Santoro, A. Lami, R. Improta and V. Barone, *J. Chem. Phys.* **128** (2008) 224311.

Many More New Features

その他、Gaussian 09 には以下の新機能が追加されています。

- ◆ 溶媒効果を考慮した計算: 上述の励起状態計算の追加機能に加えて、SCRFF 法で使用される表面電荷の新しい表式が実装されました。この表式では、反応場の連続性と滑らかさが保証され、より安定した SCRFF 計算が可能になっています。また、原子座標と外場の摂動に対する微分値の連続性も保証されています。これにより、溶液中の分子に対して、より高速で信頼性のある最適化計算と精度の高い振動数計算が可能になりました。
- ◆ Brueckner Doubles (BD)法における解析的エネルギー微分
- ◆ 光学スペクトルの計算: 解析微分による第一超分極率の計算、数値微分による第二超分極率の計算、解析微分による(動的)Raman 強度の計算、解析微分による動的 ROA 強度の計算、非調和性を考慮した振動数計算の改良
- ◆ 個々の軌道のポピュレーション解析
- ◆ フラグメント軌道を使用した SCF 計算の initial guess の設定およびポピュレーション解析
- ◆ 使い勝手の改善: リスタート機能の充実、分子指定セクション内でのフラグメントの定義、原子タイプ・ONIOM レイヤー・残基ごとに拘束を課した最適化計算、振動数計算時における興味のある振動数の選択とソート、post-SCF 計算で求めた強度データの読み書き、基準振動モードの読み書き
- ◆ 交換相関汎関数: 長距離補正、経験的パラメータを使用した分散力補正、double hybrid など
- ◆ 計算速度の改善: 大規模系の構造最適化計算、大規模系の振動数計算(16 倍程度の並列化効率)、IRC 計算(〜3 倍の計算速度)、光学旋光の計算(〜2 倍の計算速度)

●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。

Ryoka
Systems
Inc.

日本代理店

株式会社 菱化システム

科学技術システム事業部

URL: <http://www.rsi.co.jp/>

E-mail: support@rsi.co.jp

Phone: 03-3553-9206

FAX: 03-3553-9207

Ryoka Systems Inc.