

Gaussian 16 / GaussView 6

7年ぶりのメジャーバージョンアップ版がリリースされました

Gaussian は、量子化学計算ソフトウェアとして最も有名で利用者の多い製品です。1970年の初版以降、世界的に広く利用され、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。これまでにソフトウェアの機能も都度拡充されバージョンアップがなされてきました。2017年1月には、約7年ぶりのメジャーバージョンアップ版「Gaussian 16」ならびに、グラフィカルユーザインターフェースである「GaussView 6」がリリースされました。

What's new in Gaussian 16

励起状態の取り扱いやスペクトル計算における新機能が多く追加されています

- 時間依存密度汎関数法 (TD-DFT)を用いた解析的振動計算。当該機能を用いた IR・Raman スペクトル、遷移状態構造の最適化と IRC 計算が可能です。
- 振動スペクトルの非調和項の考慮。
- 分子振動準位を考慮した電子円偏光スペクトル、共鳴ラマンスペクトルの計算。
- EOM-CC 法による構造最適化。
- 新しいDFT 汎関数 (M08HX, MN15, MN15L)。
- 新しい半経験的手法 (PM7)。

計算速度向上を図る機能が追加されています

- Hartree-Fock および DFT 計算における GPU 計算への対応 (Linux 環境での NVIDIA K40・K80)。
- 多くの CPU を使用した並列計算の効率改善。
- CCSD 計算時の I/O 負荷軽減のために最適化されたメモリアルゴリズム。
- 構造最適化アルゴリズム GEDIIS の改良。
- 大きな Active space[>(10,10)]を用いた CASSCF 計算の効率改善。

計算パラメータのデフォルト値に変更があります

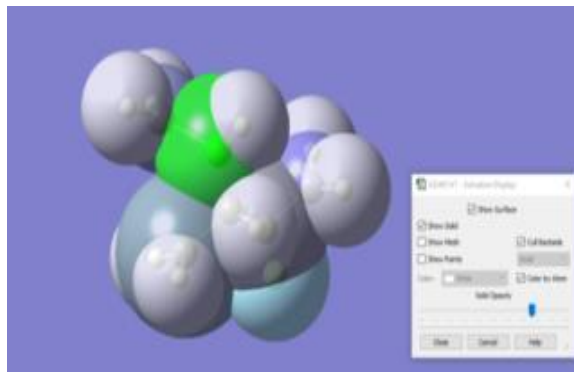
(ハードウェア発展に伴い計算速度が向上したことから、精度を向上させるような変更になっています)

- 積分精度の初期設定が、 10^{-10} から 10^{-12} へと高精度化されました。
- DFT のグリッドが、FineGrid から UltraFine に変更されました。
- メモリの使用量が 800MB (100MW) になり、多くのメモリを確保するような初期設定になりました。
- TD-DFT 計算において、解析的二次微分がデフォルトになり計算が高速化します (G09 では数値微分のみでした)。

What's new in GaussView 6

解析機能の拡充がなされています

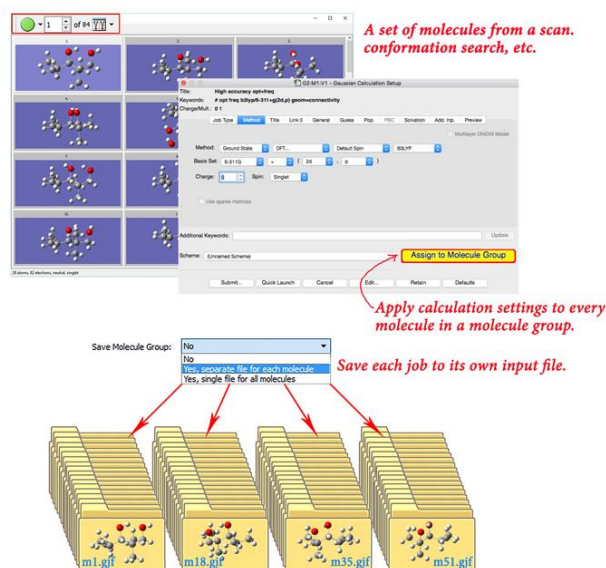
- 非調和項を考慮した IR・ラマン・VCD・ROA の表示。
- SCRF 計算の溶媒和空隙の表示。
- 旋光分散スペクトルの表示。
- 分子振動準位を考慮した各種スペクトル、および Duschinsky 行列の表示。



SCRF 計算における溶媒和空隙の表示

計算の設定や管理を行う機能が拡充されました

- 計算サマリの出力内容の拡充。
- 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。
- 点群対称操作の機能拡充。



A set of molecules from a scan, conformation search, etc.

Apply calculation settings to every molecule in a molecule group.

Save each job to its own input file.

配座解析によって得られた 84 分子を一括して計算投入する例

株式会社モルシス

<https://www.molsis.co.jp/>



〒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