量子化学計算ソフトウェア

Gaussian 03 Revision D.01 リリース

昨年12月にGaussian 03の新しいリビジョンD.01がリリースされました[1]。今回のリビジョンアップのトピックスは、NMR計算機能の改良、新しい汎関数の追加、Gaussian 03 for Windows（G03W）パラレル版のリリースです。今回は、これら３つのトピックスについて紹介します。

NMR計算機能の改良

NMRスピンースピンカップリング定数の計算精度を大幅に向上させるオプションが追加されました。オプションキーワードは、NMR=Mixedです。

このオプションでは、スピンースピンカップリング定数計算を2ステップに分けて行います。第1ステップでは、ユーザ指定の基底関数をもとに内殻軌道にFermi Contact項に適した分極関数を加え、Fermi Contact項を計算します。第2ステップでは、Fermi Contact項以外の3つの項をユーザ指定の基底関数で計算します。最終的には、両者の寄与を考慮したスピンースピンカップリング定数が出力されます。

本オプションは、特に6-31G**やAug-CC-pVTZなどの典型的な基底関数を用いたときに有用です。

新しい汎関数の追加

TPSSTPSSとBMK汎関数が追加されました。TPSSTPSSは、meta-GGA（Generalized Gradient Approximation）汎関数に分類される交換相関汎関数で、交換・相関エネルギーをより高精度で求めることができます。一方、BMKは、密度汎関数法では難しいとされる反応障壁を正確に（2 kcal/mol以内の精度で）求めるために設計されたハイブリッド汎関数です。

Gaussian 03 for Windowsパラレル版のリリース

待望のG03Wパラレル版がリビジョンアップに合わせてリリースされました。これまで、G03Wは並列計算に対応していませんでしたが、G03Wパラレル版では共用メモリマルチプロセッサ（SMP）システム（例えばデュアルプロセッサシステム）上で並列計算を実行することができます。また、ネットワーク接続された複数コンピュータに対しての並列計算も実行可能です（ただし、Scientific Computing Associates社製Lindaが必要です）。

なお、本リリースに伴いG03Wは次の2つの製品構成に変更になりました。

- G03Wシリアル版（以前のG03Wはこちらに該当します）
- G03Wパラレル版

詳細は、Gaussian社ホームページ（http://www.gaussian.com/）をご参照ください。

1) 本年3月にRev. D.02がリリースされましたが、機能の追加・修正等はなく、2つのプラットフォームの追加のみの改訂です。

Ryoka Systems Inc.
株式会社
菱化システム

科学技術システム本部
計算科学部

〒104-0033
東京都中央区新川１－２８－３８
東京ダイヤビル３号館３階

TEL：03-3553-9206
FAX：03-3553-9207
E-mail：support@rsi.co.jp
URL：http://www.rsi.co.jp/

◆ 弊社ホームページには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。

◆ 弊社取り扱い製品のカタログ、資料のご請求、お問い合わせについては左記までご連絡ください。

◆ 本ニュースレターは、弊社取り扱い製品をご購入いただきましたサイトの担当者にお送りしています。その他に発送のご希望がございましたら弊社までご連絡ください。

記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

RSIニュースレター
Vol. 13, No. 2, 2006
2006 年 4月 1日 発行
発行人 後藤 純一
発行所 株式会社菱化システム
Copyright © 2006 Ryoka Systems Inc.