

量子化学計算ソフトウェア

Molpro 販売開始

昨年12月より量子化学計算ソフトウェアMolpro (University College Cardiff Consultants社) の販売を開始しました。

Molproは、ドイツStuttgart大学Werner教授と英国Cardiff大学Knowles教授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、静的電子相関の取り扱いに関する様々な機能を有し、多配置SCF、多参照摂動法、クラスター展開法などの計算機能を搭載しています。また、これらの方法は、分子サイズが大きくなるに従って急激に計算コストが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 methods¹⁾を採用し、より大きな分子を取り扱うことができます。

Molproの主な機能は下記のとおりです。

- ・ 構造最適化
- ・ 基準振動解析
- ・ 反応座標解析

- ・ **ハミルトニアン**
HF, DFT, MCSCF, CASSCF, CISD, CEPA, MRCI, MRPT2, MRPT3, MP2, LMP2, QCISD, CCSD, BCCD, FullCI
- ・ **その他の解析機能**
 - MCSCF波動関数を用いた non-adiabatic coupling matrix elements²⁾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
 - スピン-軌道相互作用
 - ポピュレーション解析
 - 局在化軌道の出力
 - Distributed Multipole Analysis³⁾による密度行列解析

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

2) H. J. Werner, B. Follmeg, M. H. Alexander, *J. Chem. Phys.* **89**, 3139 (1988),
T. Pacher, L. S. Cederbaum, H. Köppel *J. Chem. Phys.* **89**, 7367 (1988).

3) A. J. Stone, *Chem. Phys. Letters* **83**, 233 (1981).

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

〒279-0012

千葉県浦安市入船 1-5-2
明治安田生命新浦安ビル4F

TEL: 047 (380) 1231

FAX: 047 (380) 1239

E-mail support@cubs.bio.rsi.co.jp

http://www.rsi.co.jp/science.html

- ◆ 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、ソフトウェア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

発行人 後藤 純一

Vol. 12, No. 2, 2005

発行所 株式会社菱化システム

2005年4月1日発行

Copyright © 2005 Ryoka System Inc.