

量子化学計算ソフトウェア

Molpro新バージョンの紹介



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量子化学計算ソフトウェアです。電子相関の精確かつ効率的な取り扱いに特長があり、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様々な計算機能を搭載しています。

昨年末にMolproの新バージョン2015.1がリリースされました。主要な新機能について本稿にて紹介します。

■計算手法

新バージョンでは、新たな計算手法として次のような機能が追加されました。

■ Vibrational multi-reference methods: VMCSFCF, VMRCI

振動多参照法が導入されました。VMCSFCFレベルでモデルを最適化することが可能です。また、相関効果は、それぞれの計算レベルで変分的に考慮できます。

■ Vibrational perturbation theory: VPT2

semi-quartic force field(QFF)に基づく、VPT2法が導入されました。これにより、少ないコストで非調和振動数や振動定数を計算することが可能になります。

■計算精度の改善

より高精度な計算を実行できるように、次のような機能が追加されました。

■ Beyond LMP2 treatment of intermolecular pairs in local coupled cluster methods

LMP2ではvan der Waals相互作用を取り扱うことが難しく、このためLCCSD(T)の計算精度を損なっていました。新バージョンでは、LMP2を超えるレベル(local direct RPAからLCCD[S]-Rの範囲)、かつ計算コストの増大を抑えた方法で、近接したペアを取り扱うことが可能になりました。

■ Anharmonic Franck-Condon factors: FCON

非調和振動波動関数に基づくFranck-Condon計算が導入されました。この機能により、正確な光電子スペクトル(吸収、蛍光)を計算することが可能です。なお、本機能では、新しく開発したプログラムSURFTRANSを使用します。

■物性計算

物性計算に関する機能改善を図るため、次のような機能が追加されました。

■ Intrinsic bond-orbital analysis and orbital localization (IBO)

IBOは、局在化軌道を求め、波動関数を解析するための効率的で信頼できる方法です。

■ Interface to NBO6

自然結合軌道解析(NBO)バージョン6に対するインターフェースが導入されました。

■ Magnetizability and rotational g-tensor at DF-LMP2 level using GIAOs

NMR化学シフトを計算する機能が拡張され、磁化率や回転gテンソルが計算できるようになりました。

■ Raman scattering activities

すべての振動SCFや振動相関プログラムにおいて、ラマン散乱活性を計算できるようになりました。分極率はHartree-Fockレベルの計算に限られます。

■ Localized normal coordinates

SURFプログラムを用いて、多次元ポテンシャルエネルギー曲面を局在化基準座標で表すことが可能になりました。

■ Orbital relaxed properties and analytical nuclear gradients for excited states

軌道緩和を考慮した励起状態のプロパティや解析的エネルギー勾配をlocal CC2やlocal ADC(2)で計算できるようになりました。これにより、大きな発色団の励起状態の構造最適化が行えます。さらに、local ADC(2)を用いることで、ADC(2)レベルの遷移モーメントが得られます。

- ・弊社Webサイトには、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。
- ・電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバーは下記URLをご利用ください。
<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/news/newsletter.html>
- ・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ご担当者様にお送りしています。その他に発送を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. 23, No. 2, 2016

2016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 © 2016 Ryoka Systems Inc.

Ryoka
Systems
Inc.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/>TEL: 03-6830-9724 FAX: 03-5610-1161 E-mail: support@rsi.co.jp