

# Gaussian16 & GaussView6 リリース

## Gaussian16新機能

### 新しいモデリング性能

- ◆ TD-DFT解析の二次微分: 励起状態の振動数/IR、ラマンスペクトル、遷移状態構造の最適化とIRC
- ◆ 励起状態構造最適化のためのEOMCC解析的勾配計算
- ◆ VCDおよびROAスペクトルへの非調和振動解析
- ◆ 振電スペクトルとその強度の計算機能
- ◆ 共鳴ラマンスペクトル計算
- ◆ 新規DFT汎関数: M08、MN15
- ◆ 新規double-hybrid法: DSDPBEP86, PBE0DH, PBEQIDH
- ◆ Adamolによる励起状態電荷移動診断法
- ◆ CaricatoによるEOMCC溶媒和相互作用モデル

### 計算性能の強化

- ◆ Linux環境下で、GPUのNVIDIA K40およびK80を使ってHartree-FockおよびDFT計算を実行可能
- ◆ 多数のプロセッサ上での並列性能が向上
- ◆ CCSD繰り返し計算時のI/Oを避けるための最適化されたメモリアルゴリズム
- ◆ GEDIIS最適化アルゴリズムの性能を強化
- ◆ アクティブスペースが(10,10)以上のCASSCF計算の改良 (最大16軌道)
- ◆ W1化合物モデルの内殻相関エネルギー計算の大幅な速度向上
- ◆ CEP法の対角二次自己エネルギー近似 (D2)項の計算の大幅な速度向上

### 使用法の強化

- ◆ FortranやCのようなコンパイラ言語や、PythonやPerlのようなインタープリター型言語で書かれたプログラムと、Gaussianとのインターフェイスを担うツールが用意されています。
- ◆ 入力ファイルのLink 0 (%)やDefault.Routeファイルに設定していた変数を、コマンドラインの引数で指定したり環境変数で指定することが可能になりました。
- ◆ 構造最適化計算で、力の定数を最適化のnステップ毎に計算するように設定できます。

## GaussView6新機能

### 結果の可視化

- ◆ **非調和振動解析**  
IR, Raman, VCDおよびROAスペクトルの調和、非調和振動解析の結果を表示することが可能です。
- ◆ **PCM溶媒和キャビティの表示**  
SCRF計算に用いる溶媒和キャビティを表示することが可能です。
- ◆ **旋光分散(ORD)**  
旋光分散計算の結果をプロットできるようになりました。
- ◆ **振電スペクトル**  
振電スペクトルとDuschinsky行列を含む、振電相互作用解析結果の表示を新たに可能にしました。
- ◆ **計算結果の概要表示の強化**  
計算結果の概要を広範囲に見ることができるようになりました。
- ◆ **動画の保存**  
通常モードのアニメーションや基準振動モードの動画をMP4形式のビデオファイルで保存できます。
- ◆ **プロットの結合**  
複数のデータを元にそれらを統合したプロットを表示することができます。

### 計算ジョブのセットアップ機能

- ◆ **複数ジョブの一段階でのセットアップ**  
グループ内の複数の分子に対するGaussianジョブを、いくつかの操作でまとめて設定可能です。
- ◆ **GMMX配座探索**  
追加モジュールを用いて配座探索を実行することが可能になりました。
- ◆ **SCジョブ管理**  
ローカルコンピューターのキューイングシステム: SCジョブマネージャーが、組み込まれました。
- ◆ **対称性**  
点群対称性機能で、選択している分子の対称性を上げることが可能です。
- ◆ **Brush選択ツール**  
原子が多過ぎて個別に選択するのが非効率であったりうまく選択できない、密集したクラスター中の原子を素早く選択するのに有効です。
- ◆ **ジョブセットアップ新機能**  
Gaussian Calculation Setupダイアログには多くの新機能が追加されました。

## コンフレックス株式会社

〒108-0074

東京都港区高輪3-23-17

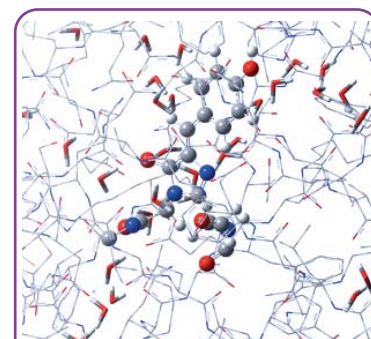
品川センタービルディング6F

TEL : 03-6380-8290

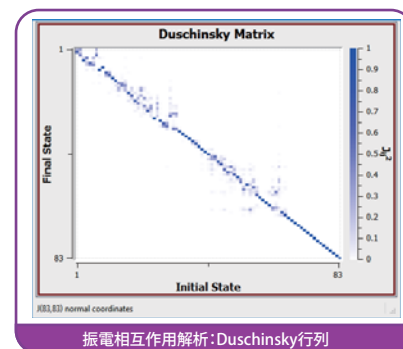
FAX : 03-6380-8299

Email : info@conflex.co.jp

http://www.conflex.co.jp/



ONIOM (TD B3LYP : Amber)



振電相互作用解析: Duschinsky行列



PCM溶媒和キャビティの表示