

CONFLEX&Interface Ver.8 (Rev.B)

CONFLEXはフレキシブルな分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけ出します。実践的に意味のある安定な配座異性体を優先的に創出することにより、効率的な配座空間探索を実現します。

また、分子構造データと空間群の対称性を入力することで、自動的に結晶構造を作成して構造最適化を行ない、エネルギー極小に位置する結晶構造を網羅的に算出します。

コンプレックス株式会社

〒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/>

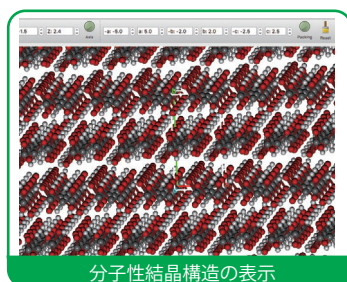
CONFLEX USA

Email : cust-info@conflex.net

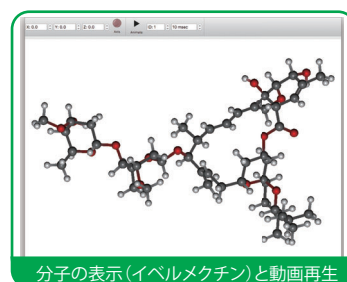
<http://www.conflex.net/>

CONFLEX8 新機能

- ◆ 動的反応座標 (Dynamic Reaction Coordinate, DRC) 計算を新たに導入しました。この機能により、基準振動モードを利用した簡易的な分子動力学計算を行うことが可能です。
- ◆ 構造最適化計算や配座探索時に、外部プログラムとしてGaussianを呼び出して計算を行えるようになりました。これにより、分子力場による計算が困難な系でも配座探索を行えます。
- ◆ 結晶構造最適化計算を、共有メモリ型並列処理 (OpenMP) を用いて高い並列化効率で実行できるようになりました。これに伴い、MPI並列による結晶構造最適化計算機能を廃止しました。
- ◆ MPI/OpenMPハイブリッド並列による、結晶構造探索計算の高速化を実現しました。
- ◆ Interface上での結晶構造表示の高速化を実現しました。
- ◆ Interfaceにおいて、振動計算やDRC計算の結果をアニメーション表示することが可能になりました。



分子性結晶構造の表示



分子の表示 (イベルメクセン) と動画再生

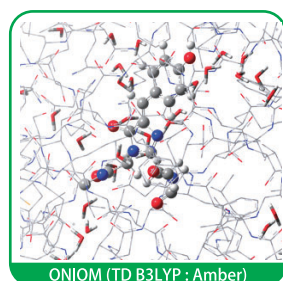
Gaussian16 (Rev.B.01) & GaussView6

Gaussian16 新機能

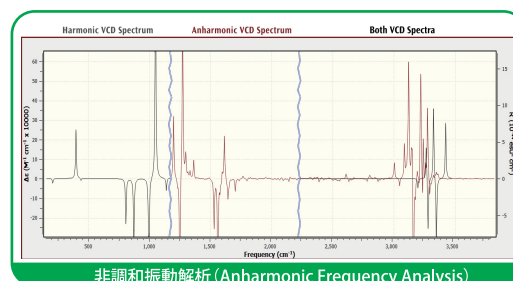
- ◆ 励起状態の振動数/IRおよびラマンスペクトルの予測、および遷移状態構造の最適化とIRC計算を実行するための、TD-DFT解析的二次微分計算が導入されました。
- ◆ 励起状態構造最適化のためのEOMCC解析的勾配計算が導入されました。
- ◆ VCDおよびROAスペクトルへの非調和振動解析が追加されました。
- ◆ 振電スペクトルとその強度の計算機能が導入されました。
- ◆ 共鳴ラマンスペクトル計算が導入されました。
- ◆ 新規DFT汎関数が追加されました: M08, MN15
- ◆ 新規double-hybrid法が導入されました: DSDPBEP86, PBE0DH, PBEQIDH
- ◆ Linux環境下で、GPUのNVIDIA K40, K80, P100を使ってHartree-Fock及びDFT計算の実行が可能です。(P100対応はRev.B.01から)

GaussView6 新機能

- ◆ 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。
- ◆ SCRF計算に用いる溶媒和キャビティーを表示することが可能です。
- ◆ 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。
- ◆ 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。
- ◆ 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。
- ◆ 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。



ONIOM (TD B3LYP : Amber)



非調和振動解析 (Anharmonic Frequency Analysis)