

CONFLEX & Interface Ver. 9 (Rev. A) リリース!

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

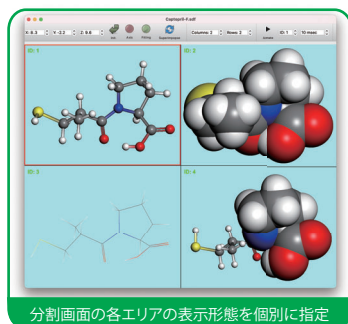
FAX : 03-6380-8299

Email : info@conflex.co.jp

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

CONFLEX9 新機能

- ◆ 結晶構造最適化に完全対角Newton-Raphson法が利用できるようになりました。結晶構造探索にかかる時間を大幅に削減できます。
- ◆ 静電相互作用計算にEwald法が利用できるようになりました。遠距離まで働く静電相互作用を高速かつ高精度に計算することができます。
- ◆ AMBER用の入力ファイルを用いて、AMBER力場による構造最適化と配座探索を行えるようになりました。
- ◆ Interfaceにおいて、分子の一部の表示形態を変更できるようになりました。
- ◆ Interfaceにおいて、分割画面の各エリアの表示形態を個別に指定できるようになりました。
- ◆ Interfaceにおいて、表計算機能が追加されました。



分割画面の各エリアの表示形態を個別に指定

Conformation No.	E (CONFLEX)	E (CONFLEX)	E (CONFLEX)	E (TOTAL)	E (TOTAL)
1	0.000001	-1.737814	10.35536	18.61761	18.61761
2	0.000001	-1.739885	9.650561	18.37945	18.37945
3	0.000001	-1.656803	14.32152	18.66832	18.66832
4	0.000001	-1.381804	8.874059	18.14122	18.14122
5	0.000001	-1.160379	6.232191	18.23219	18.23219
6	0.000001	-1.097076	5.506897	18.34683	18.34683
7	0.000001	-1.028161	4.922227	18.48673	18.48673
8	0.000001	-0.9784872	4.491259	18.54928	18.54928
9	0.000001	-0.8828855	3.114881	18.76828	18.76828
10	0.000001	-0.7710191	3.891754	18.87073	18.87073
11	0.000001	-0.6444454	2.871233	18.95879	18.95879
12	0.000001	-0.5027392	2.154490	19.04897	19.04897
13	0.000001	-0.4232344	1.694622	19.13412	19.13412
14	0.000001	-0.3701062	1.150383	19.21453	19.21453
15	0.000001	-1.4248971-02	0.892109	19.37029	19.37029

CONFLEX Spreadsheet

CONFLEX Global

Email: cust-info@conflex.net

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

Gaussian16 (Rev.C.01) & GaussView6 (6.1.1)

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**, **V100**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、V100対応はRev.C.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。

