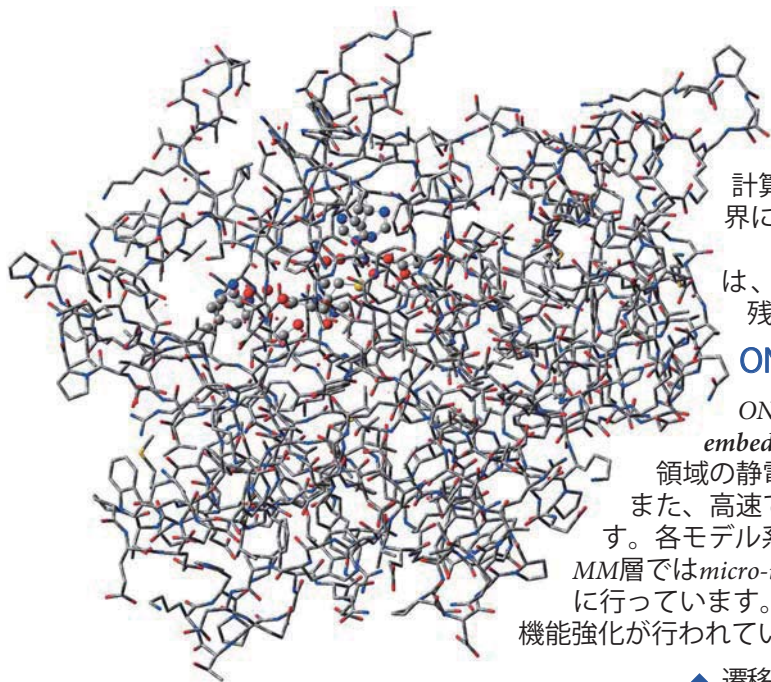




# A first look at Gaussian 09



## 新機能の解説

Gaussian 09には、多くの新機能が盛り込まれ、計算速度も向上しています。これにより、現実世界に即したより広範囲の条件での、大きな系の分子の扱いや精度の向上が可能となります。ここでは、これらのうちのいくつかを詳しく説明し、残りは概要を説明します。

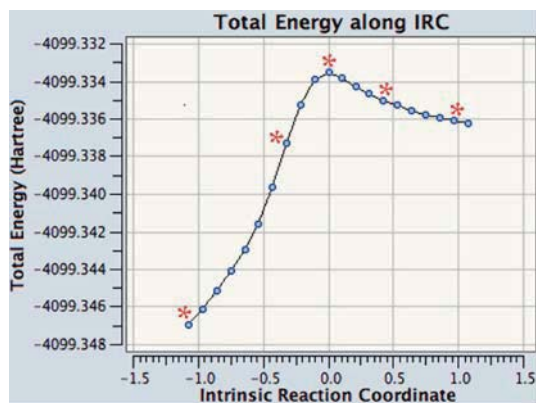
## ONIOMを使用した巨大系の反応モデリング

ONIOMは、MO:MM計算において「*electronic embedding*」機能を持っています。それによって、MM領域の静電特性がQM領域の計算時に取り入れられます。

また、高速で信頼性のある最適化アルゴリズムを持っています。各モデル系内での原子間カップリングを取り入れ、特にMM層では*micro-iteration*を全体のリアル系の最適化ステップの間に行っています。Gaussian 09では、ONIOMに関して以下の多くの機能強化が行われています：

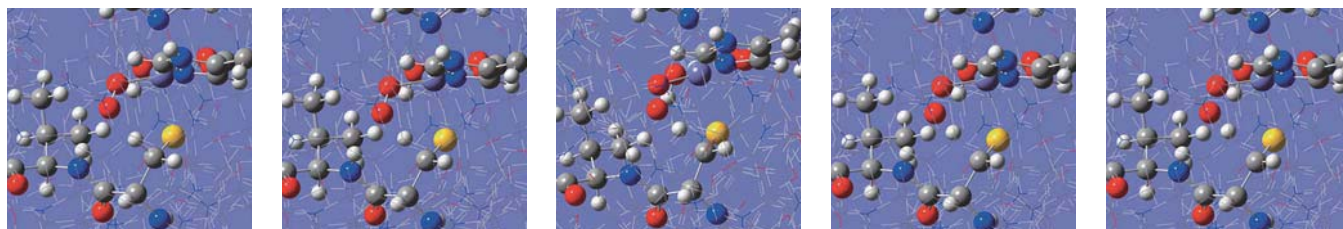
- ◆ 遷移状態の構造最適化
- ◆ より高速なIRC計算
- ◆ 「*electronic embedding*」を含んだ振動計算
- ◆ 溶媒中での計算
- ◆ 実行速度の向上
- ◆ 全体にわたってカスタマイズできるMM力場
- ◆ 正確な解析的勾配と振動数による、新たなAM1, PM3, PM3MM, PM6, PDDG半経験的方法の実装  
(パラメーターは全てカスタマイズ可能)

非heme型の鉄酵素isopenicillin N synthase (IPNS) 原子数5,368 (図は水素原子を非表示)。これは、基本的な生化学過程での重要な触媒の典型的なものです。この分子をモデリングする事により、タンパク質の母体と金属中心が個別に酵素系の触媒活性にどのように寄与しているかと言う事が明らかになりました。参考文献: M. Lundberg, T. Kawatsu, T. Vreven, M. J. Frisch and K. Morokuma, JCTC 5 (2009) 222.



IRCのエネルギープロット。Gaussian 09のONIOM機能により、研究中の反応の遷移状態構造を最適化しました。構造最適化でのmacroとmicroの繰り返し手法を完全にカップリングしているため、MM層内部のQM層の二次カップリングが明示的に含まれます。最適化された遷移状態構造は、振動数計算により検証しました。そして、反応経路を計算するためIRCの出発構造としました。計算により得られた結果のプロットを左に示します。

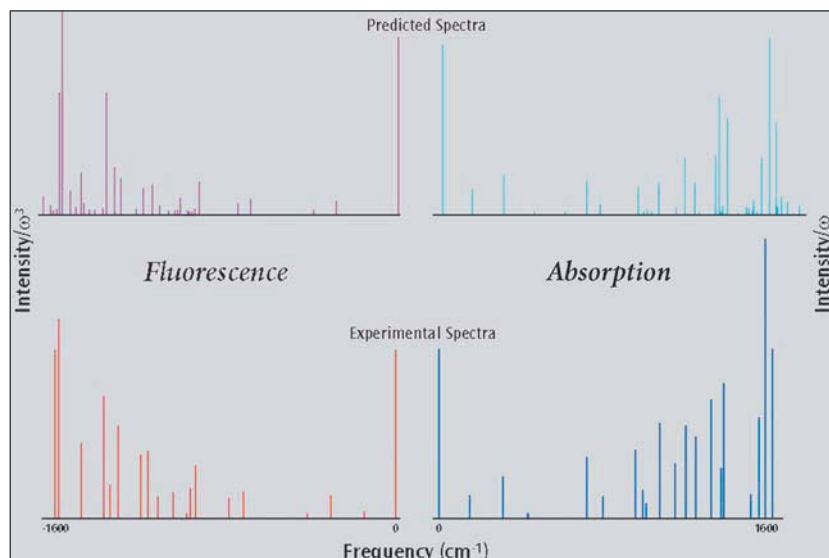
計算したIRCからの構造。これらの構造に対応するエネルギープロット上の点を、アスタリスクで示します(左から右)。中央の構造が遷移状態です。反応経路上で、黄色で示した硫黄原子の近くの水素原子が転移して行くのが分かります。GaussView 5で、IRCアニメーションのこれらの図を静止画として作成しました。



## 気相および溶媒中での励起状態の研究

Gaussian 09には、励起状態系や反応とその過程を研究するための新しい多くの機能が含まれています：

- ◆ 解析的な時間依存DFT (TD-DFT) 勾配
- ◆ EOM-CCSD法
- ◆ 状態固有の溶媒和励起および低準位への遷移
- ◆ Franck-Condon and Herzberg-Teller解析 (FCHT)
- ◆ 溶媒中 (平衡および非平衡) でのCISおよびTD-DFT計算の完全対応



ポルフィリンのQバンドの、計算したものと実測スペクトルとの比較。これらのグラフは、高解像度準線形吸収および発光バンドを比較したものです。プロットは、計算および実測の強度を $\omega$  (吸収) および $\omega^3$  (発光) で割ったものです。基底状態をDFT法で励起状態をTD-DFT法でPBE1PBE関数 (いわゆるPBE0) を用い、構造最適化および振動数計算を行いました。基底状態から遷移状態への振動解析での電子遷移強度はFranck-Condon Herzberg-Teller法を用いました。これら全ての機能は、Gaussian 09に実装されています。

計算したスペクトルの振動数軸は0.95をかけて縮めています。より詳細な計算内容については、以下の文献をお読みください：

F. Santoro, A. Lami, R. Improta and V. Barone, J. Chem. Phys. 128 (2008) 224311.

## その他の新機能

Gaussian 09には、他にも以下のような新機能が導入されています：

- ◆ 溶媒和機能の大幅な強化：上で述べた励起状態系での機能に加え、SCRFに新しい機能が実装されています。形式的な連続平面電荷により、反応場の連続性、平滑性および堅牢性を保証します。また、原子の位置と外部摂動場に関する微分の連続性も保証されます。この結果、溶媒中での高速でより信頼性の高い (気相と変わらないステップ数での) 構造最適化と正確な振動数計算が可能になります。
- ◆ Brueckner Doubles (BD) 法による解析的勾配
- ◆ 追加のスペクトル予測機能：DFTによる解析的な一次超分極率と数値的な二次超分極率、解析的な静的および動的Raman強度、解析的な動的ROA強度、改良非調和振動数計算。
- ◆ 個々の軌道のポピュレーション解析
- ◆ フラグメントに基づいた、初期guessとポピュレーション解析
- ◆ 操作性の向上：より多くの計算タイプが、信頼性よく再計算可能に。これらには、分子中のフラグメント定義、型による原子の固定、フラグメント定義、ONIOMの層や残基、振動数計算での注目する基準振動の選択や並べ替え、post-SCF強度の保存と読み込み、基準振動の保存と読み込みが含まれます。
- ◆ 多くのDFTの新機能：長距離補正、経験的分散およびdouble hybrid汎関数
- ◆ プログラムの至る所に大幅な速度向上がなされています。大きな分子の構造最適化が高速化され、振動数計算が並列で1.6倍、IRC計算で3倍、旋光度計算で2倍の向上がなされています。

Gaussian, Inc.  
340 Quinipiac St., Bldg 40  
Wallingford, CT 06492 USA  
Voice: 203-284-2501  
Fax: 203-284-2521  
info@gaussian.com  
www.gaussian.com

Gaussian, Inc. reserves the right to make corrections, updates, revisions, and changes to these specifications without notice. *Gaussian* and *GaussView* are registered trademarks and *Expanding the limits of computational chemistry* is a service mark of Gaussian, Inc. All other trademarks and registered trademarks are the properties of their respective holders.

Copyright 2009, Gaussian, Inc. All rights reserved.

Printed in the U.S.A.



コンプレックス株式会社

〒141-0021 東京都品川区上大崎2-15-19  
アイオス目黒駅前ビル6F  
TEL:03-6380-8290 FAX:03-6380-8299  
http://www.conflex.co.jp/ E-mail:info@conflex.co.jp