

GRRMプログラム機能比較表

機能(Job-type / Option)	GRRM1.22	GRRM-Basic	GRRM11	GRRM-Neo11	GRRM14	GRRM17	GRRM20	GRRM20 with Matlantis	GRRM23
反応経路自動探索 (ADDF) a	○	○	○	○	○	○	○	○	○
振動解析 (FREQ)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
零点振動エネルギー補正	○	○	○	○	○	○	○	○	○
熱力学関数 (G、H、S 等) 計算	○	○	○	○	○	○	○	○	○
安定構造最適化 (MIN)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
遷移構造最適化 (SADDLE)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
固有反応座標追跡 (IRC)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
反応中間体解析 (SCW)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
2点間遷移状態探索 (2PSHS)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
構造自動再最適化 (ReStruct)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
エネルギー自動再計算 (ReEnergy)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
初期構造自動発生 b	○	○	○	○	○	○	○	○	○
座標指定 パート(原子団)指定	○	○	○	○	○	○	○	○	○
部分構造固定 c	○	○	○	○	○	○	○	○	○
階層指定 (ONIOM)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
MicroIteration	×	×	○	○	○	○	○	○	○
制限探索 EQOnly	○	○	○	○	○	○	○	○	○
FirstOnly	○	○	○	○	○	○	○	○	○
NoBondRearrange	○	○	○	○	○	○	○	○	○
BondCondition	×	×	○	○	○	○	○	○	○
Large ADD Following (LADD)	○	○	○	○	○	○	○	○	○
NLowest	○	○	○	○	○	○	○	○	○
励起状態解析 各スピン多重度最低状態	○	○	○	○	○	○	○	○	○
励起状態一般	×	×	○	○	○	○	○	○	○
MSX解析	×	×	○	○	○	○	○	○	○
円錐交差解析	×	×	○	○	○	○	○	○	○
反応経路自動探索 (AFIR)									
MC-AFIR	×	×	×	×	○	○	○	○	○
SC-AFIR	×	×	×	×	×	○	○	○	○
DS-AFIR	×	×	×	×	×	○	○	○	○
AFIRの探索の手法を外部から変更するインターフェース	×	×	×	×	×	×	○	○	○
AFIR 経路の改良 LUP	×	×	×	×	○	○	○	○	○
RePath	×	×	×	×	○	○	○	○	○
周期境界条件探索 (結晶と表面に対応)	×	×	×	×	×	×	○	○	○
反応速度論解析	×	×	×	×	×	×	○	○	○
速度論を考慮した探索	×	×	×	×	×	×	○	○	○
量子化学的逆合成解析 (QCaRA)	×	×	×	×	×	×	×	×	○
並列探索ノード内	×	○	○	○	○	○	○	×	○
並列探索ノード間 (NeoGRRM)	×	○	×	○	×	×	×	×	×
並列探索ノード間 (MPI)	×	×	×	×	×	○	○	×	○
外部プログラムインターフェース	増設可能	増設可能	増設不可	増設不可	増設可能	増設可能	増設可能	増設可能	増設可能
内蔵インターフェース	GAUSSIAN	GAUSSIAN	GAUSSIAN	GAUSSIAN	GAUSSIAN	GAUSSIAN	GAUSSIAN	PFCC社提供の 連携モジュールで Matlantis™と連携	GAUSSIAN
			MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO		MOLPRO
					GAMESS	GAMESS	GAMESS		GAMESS
						TURBOMOL	TURBOMOL		TURBOMOL
						SIESTA	SIESTA		SIESTA
							ORCA		ORCA
ユーザー開発ツールを容易に実装可能にするユーティリティ	×	×	×	×	×	×	×	×	○
商用版	×	○	×	○	×	×	○	○	○

a ADD-Following(ADDF)による自動探索の Job-type 名は、GRRM14 以前では GRRM、GRRM17 以降では ADDF となっている。

b この Option 名は、GRRM1.22(GRRM-Basic)では MaxRUN、その他では NRUN。

c 座標入力で、可動座標を先に入れ、その後に入れる固定座標の直前に、GRRM1.22(GRRM-Basic)では FIELD を、他では Frozen Atoms を入れて区分する。

d GRRM20 with Matlantis のGRRMでは並列探索に未対応です。

(細かな Option やデフォルトのパラメータ値を変更する機能については省略した)