GRRMプログラム機能比較表

GRRMプログラム機能比較表								GRRM20 with	
機能(Job-type / Option)	GRRM1.22	GRRM-Basic	GRRM11	GRRM-Neo11	GRRM14	GRRM17	GRRM20	Matlantis	GRRM23
反応経路自動探索 (ADDF) a	0	0	0	0	0	0	0	0	0
振動解析(FREQ)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
零点振動エネルギー補正	0	0	0	0	0	0	0	0	0
熱力学関数(G、H、S等)計算	0	0	0	0	0	0	0	0	0
安定構造最適化(MIN)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
遷移構造最適化(SADDLE)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
固有反応座標追跡(IRC)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
反応中間体解析(SCW)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2点間遷移状態探索(2PSHS)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
構造自動再最適化(ReStruct)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
エネルギー自動再計算 (ReEnergy)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
初期構造自動発生 b	0	0	0	0	0	0	0	0	0
座標指定 パート(原子団)指定	0	0	0	0	0	0	0	0	0
部分構造固定 c	0	0	0	0	0	0	0	0	0
階層指定(ONIOM)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
MicroIteration	×	×	0	0	0	0	0	0	0
制限探索 EQOnly	0	Ô	0	0	0	0	0	0	0
FirstOnly	0	0	0	0	0	0	0	0	0
NoBondRearrange	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-	×	×	0	0	0	0	0	0	0
BondCondition	0								
Large ADD Following (LADD)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
NLowest			0	0		_	_	_	0
励起状態解析 各スピン多重度最低状態	0	0	0	0	0	0	0	0	0
励起状態一般	×	×	0	0	0	0	0	0	0
MSX解析	×	×	0	0	0	0	0	0	0
円錐交差解析	×	×	0	0	0	0	0	0	0
反応経路自動探索(AFIR)							_	_	
MC-AFIR	×	×	×	×	0	0	0	0	0
SC-AFIR	×	×	×	×	×	0	0	0	0
DS-AFIR	×	×	×	×	×	0	0	0	0
AFIRの探索の手法を 外部から変更する インターフェース	×	×	×	×	×	×	0	0	0
AFIR 経路の改良 LUP	×	×	×	×	0	0	0	0	0
RePath	×	×	×	×	0	0	0	0	0
周期境界条件探索(結晶と表面に対応)	×	×	×	×	×	×	0	0	0
反応速度論解析	×	×	×	×	×	×	0	0	0
速度論を考慮した探索	×	×	×	×	×	×	0	0	0
量子化学的逆合成解析(QCaRA)	×	×	×	×	×	×	×	×	0
並列探索ノード内	×	0	0	0	0	0	0	× d	0
並列探索ノード間(NeoGRRM)	×	0	×	0	×	×	×	×	×
並列探索ノード間(MPI)	×	×	×	×	×	0	0	× d	0
		増設可能	増設不可		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	100	GAUSSIAN
1300012772		J. 15 302 111	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	1	MOLPRO
			3 2.1 110	52.110	GAMESS	GAMESS	GAMESS	PFCC社提供の	GAMESS
					G, 1111E00	TURBOMOL	TURBOMOL	連携モジュールで	TURBOMOL
						SIESTA	SIESTA	Matlantis™と連携	SIESTA
						5.25171	ORCA	1	ORCA
 ユーザー開発ツールを容易に実装可能にするユー							URUA		
ティリティ	×	×	×	×	×	×	×	×	0
商用版 a ADD-Following(ADDF)による自動探索の Job-type 名は、	×	0	X	0	×	×	0	0	0

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)