

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	GRRM23	GRRM26
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	×	×	×	×	×	×	○	○	○
濃度効果の明示的考慮	×	×	×	×	×	×	×	×	○
マイクロカノニカルアンサンブル下での実行	×	×	×	×	×	×	×	×	○
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)	×	×	×	×	×	○	○	○	○
高速エネルギー計算プログラム向け探索性能最適化	×	×	×	×	×	×	×	×	○
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	GAUSSIAN	GAUSSIAN
			MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO
					GAMESS	GAMESS	GAMESS	GAMESS	GAMESS
					TURBOMOL	TURBOMOL	TURBOMOL	TURBOMOL	TURBOMOL
					SIESTA	SIESTA	SIESTA	SIESTA	SIESTA
						ORCA	ORCA	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。

(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)