

大学・官公庁のお客様限定

Reaction plus キャンペーン

Reaction plus Pro 2 / Reaction plus Express 2

キャンペーン期間
期間内ご注文分まで

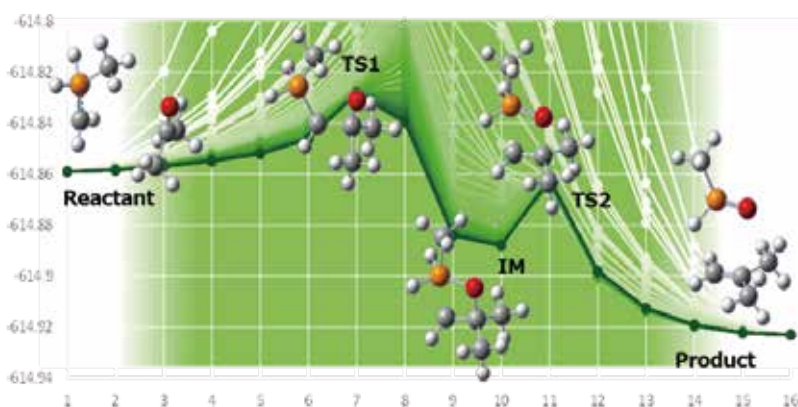
2022.4.13 MON ▶ 6.20 MON

※ 本キャンペーンは予告なく変更・終了する場合がございます。あらかじめご了承ください。
※ キャンペーン期間内であっても、キャンペーン対象製品の在庫がなくなり次第終了となります。



反応物と生成物の構造を指定するだけで、それらを結ぶ反応経路が自動的に求まります

従来の反応経路(遷移状態)計算では、求めたい遷移状態構造に近い初期構造をユーザが指定してやる必要があり、反応経路計算は職人技とも言われてきました。Reaction plusでは、Nudged Elastic Band(NEB)法に基づき反応経路全体を最適化するため経路上の遷移状態構造が自動的に求まります。



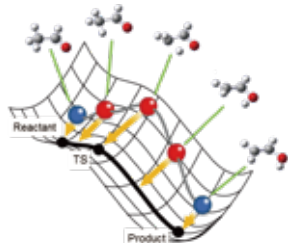
- 有機化学反応に!
- 固体表面上の反応に! Pro 2
- 生体分子の反応に!
- 光化学反応に! Pro 2

基本エンジン: NEB法

反応経路最適化方法には、改良NEB法を採用。ユーザの想定した反応経路を初期値にして、反応始状態と終状態を結ぶ最適な反応経路を探索。

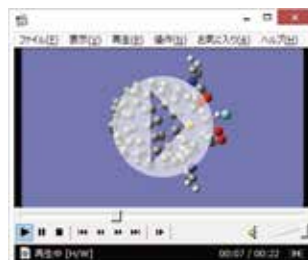
Pro 2では本格的に Express 2では超高速に 反応経路計算

Pro 2では計算エンジンにGaussianを、Express 2では高速PM6法を採用することにより高速化を実現。Pro 2では、Gaussianに搭載されているさまざまな機能—溶媒効果、励起状態計算、ONIOM計算等も利用可能です。Express 2では、わずか数十秒～数分程度で反応経路を求められ、一般的な有機化学反応なら、ここから精査計算を行うことにより正確な遷移状態を求めることも可能です。

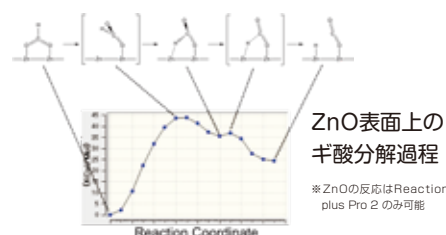
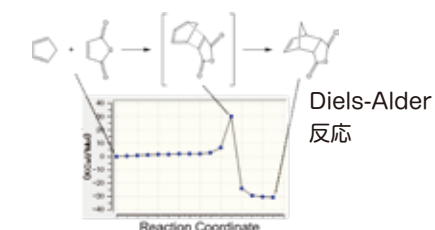


反応の様子が動画で わかる

計算結果は、GaussViewやVMD等のソフトでアニメーションとして閲覧できます。さらに、これを動画ファイルとして保存し、プレゼンソフトにコピー&ペーストすれば、効果的なプレゼンテーション資料が作成できます。



Reaction plusの計算例



■主な仕様

製品名	Reaction plus Pro 2	Reaction plus Express 2
量子化学計算(DFT計算)	○	×
PM6計算	○	◎ (超高速)
開殻系の計算	○	○
開殻→閉殻・閉殻→開殻の計算	○	×
ONIOM計算	○	×
一部の原子座標を固定	○	○
chkファイルから初期軌の読み込み	○	×
中間構造の指定	何個でも指定可能	何個でも指定可能
初期ビーズ構造の自動調整	○	○
座標軸の自動修正	○	○
インプット作成方法 ^{※1}	GaussView(推奨) Winmostar+テキスト編集 ONIOM計算支援ツール	GaussView(推奨) Winmostar+テキスト編集
初期構造読み込み対応ファイル形式	xyz, pdb, mol2	xyz, pdb, mol2
アニメーション出力ファイル形式 ^{※2}	Gaussian log xyz pdb	Gaussian log xyz pdb
別途必要ソフトウェア	Gaussian 16/09	なし

■Reaction plus適用実績

※Pro = Reaction plus Pro 2 Exp = Reaction plus Express 2

反応の種類	反応例	Pro	Exp
求核付加反応	Michael付加反応	○	○
環化付加反応	Diels-Alder反応	○	○
	ベンザインとアジドの[3+2]環化付加反応	○	○
	Sn触媒によるアリルスルフィド環化付加反応	○	○
挿入反応	紫外線照射によるCO ₂ 固定化反応	○	○
	Cu触媒によるCO ₂ 固定化反応	○	△
求電子置換反応	Kolbe-Schmitt反応	○	○
転位反応	Beckmann転位反応	○	○
カップリング反応	Mizoroki-Heck反応	○	○
	Migita-Kosugi-Stille反応のトランスメタル化	○	○
	Pd触媒クロスカップリング反応	○	○
メタセシス反応	Wittig反応	○	○
開裂・分解反応	一置換シクロブテン開裂反応	○	○
	質量分析におけるp-ベンゾキノンの断片化過程	○	○
ラジカル反応	ジラジカル分子のホモリティック閉環反応	○	×
典型元素反応	ホウ素亜鉛アート錯体の発生	○	×
	Siクラスター異性化反応	○	×
形式的分子内反応	亜鉛触媒によるインドール合成反応	○	×
	エン-アルジミンの形式的転位反応	○	-
不均一反応	酸化亜鉛表面上のギ酸分解過程	○	×
その他の反応	Pdノルコロールの「お椀」反転	○	○
	Ar原子のフラーレンへの内包過程	○	×

■新規ライセンス価格

	Reaction plus Pro 2	Reaction plus Express 2
大学	880,000円(税込)	330,000円(税込)
研究機関	2,200,000円(税込)	660,000円(税込)

※1 ONIOM計算支援ツールでは、AMBER/GROMACSファイルをGaussian (ONIOM)インプットへ変換することができます(Linux版のみ付属)。 ※2 logファイルはGaussViewまたはWinmostarを、xyz, pdbファイルはVMDまたはAvogadroを利用することでアニメーション閲覧が可能です。動作確認は、GaussView 5.0.9およびGaussView 6.0.16 for Windows, Avogadro 1.2.0 for Windows, VMD 1.9.1 for Windowsにて行っております。

Reaction plusを利用した論文実績

Sci. Rep., 2015, 5, 18471
ACS Omega, 2017, 2, 5228
J. Org. Chem., 2017, 82, 10425
Angew. Chem. Int. Ed., 2017, 56, 11822
Eur. J. Mass Spectrom., 2017, 23, 40
Chem. Phys. Lett., 2017, 686, 124
Chem. Phys. Lett., 2018, 691, 336
Chem. Int. Ed., 2018, 130, 14968
Sci. Rep., 2018, 8, 2473
Comput. Theor. Chem., 2018, 1123, 61
Eur. J., 2018, 24, 6922
Tetrahedron, 2018, 74, 3384
Chem. Eur. J., 2018, 24, 18907
Org. Lett., 2018, 20, 7554
Mass Spectrom. (Tokyo), 2018, 7, A0066
J. Am. Chem. Soc., 2019, 141, 3920
J. Am. Chem. Soc., 2019, 141, 4800
Bull. Chem. Soc. Jpn., 2019, 92, 381
J. Phys. Chem. Lett., 2019, 10, 3197
Org. Lett., 2019, 21, 4991 ... etc.

HPC5000-XIL216TS-D8 + Reaction Plus Pro 2



アカデミックのお客様限定

256GB
メモリモデル **2,310,000円(税込)**
2,100,000円(税抜)

512GB
メモリモデル **2,530,000円(税込)**
2,300,000円(税抜)

官公庁のお客様限定

256GB
メモリモデル **3,630,000円(税込)**
3,300,000円(税抜)

512GB
メモリモデル **3,850,000円(税込)**
3,500,000円(税抜)

- CPU : Xeon Gold6326 (2.90GHz, 16コア) ×2
- MEM : 256GB (16GB×16) / 512GB (32GB×16)
- SSD : 960GB×2 (システム用), 960GB×1 (スクラッチ用)
- ODD : DVD-RW
- OS : AlmaLinux 8.3
- APP : Reaction Plus Pro 2

※別途Gaussian 16/9のソフトウェアライセンスが必要になります。



HPC3000-XCL108TS-Silent + Reaction Plus Express 2



アカデミックのお客様限定

64GB
メモリモデル **968,000円(税込)**
880,000円(税抜)

官公庁のお客様限定

64GB
メモリモデル **1,298,000円(税込)**
1,180,000円(税抜)

- CPU : Xeon W2265 (3.50GHz, 12コア) ×1
- MEM : 64GB (16GB×4)
- SSD : 480GB×2 (システム用), 480GB×1 (スクラッチ用)
- VGA : NVIDIA T400
- ODD : DVD-RW
- OS : AlmaLinux 8.3
- APP : Reaction Plus Express 2



HPCシステムズ株式会社

本社(東京) : ☎ 03-5446-5531
西日本営業所(京都) : ☎ 075-353-0120

www.hpc.co.jp
hpcs_sales@hpc.co.jp