

Reaction plus Pro/Express 適用反応例

©HPC Systems Inc.



本資料の概要

- Reaction plus Pro/Expressをさまざまな反応系22例に適用した。
- Reaction plus Pro/Expressで遷移状態(TS)候補構造を求めた後、それを初期構造として GaussianでTS構造探索(QST3法)を行うことにより、正確なTS構造を得ることを試みた。
- Reaction plus Proでは、全ての反応系で正確なTS構造を求めることができた。
いずれの計算も、実験事実を再現もしくはは実験論文の提案機構を支持する結果となった。
- Reaction plus Expressでは、正確なTS探索成功率は14/20であった。
(実施20例の他、未実施1例、要詳細検討1例)
Express→QST3計算で求めたTS構造は、Pro→QST3計算での構造と同一であった。
Expressで求まらなかった反応系の特徴は、以下の通り。これらはExpressの計算手法であるPM6法の理論的限界であると推測される。
 - ・ 第3周期以降の元素の結合生成・開裂を含む反応系の一部
 - ・ 開殻→閉殻反応
 - ・ フラーレンを含む反応
 - ・ 不均一触媒反応

Reaction plus Pro/Express とは？

➤ 反応前後の分子から簡単に反応経路やTSが求まる

- Gaussianだけでは簡単に求まらなかった反応経路やTSが、簡単・手軽に求まる
- 途中経過も閲覧可能で、粗い結果で良ければ比較的早く答えが得られる

➤ 操作方法は至って簡単

- GaussView等の市販可視化ソフトで、入力ファイル作成・出力ファイル解析および反応経路の動画表示が可能
- 意味不明な計算条件パラメータは設定不要、分子構造のみで制御

➤ Expressなら計算時間はわずか数十秒～数分

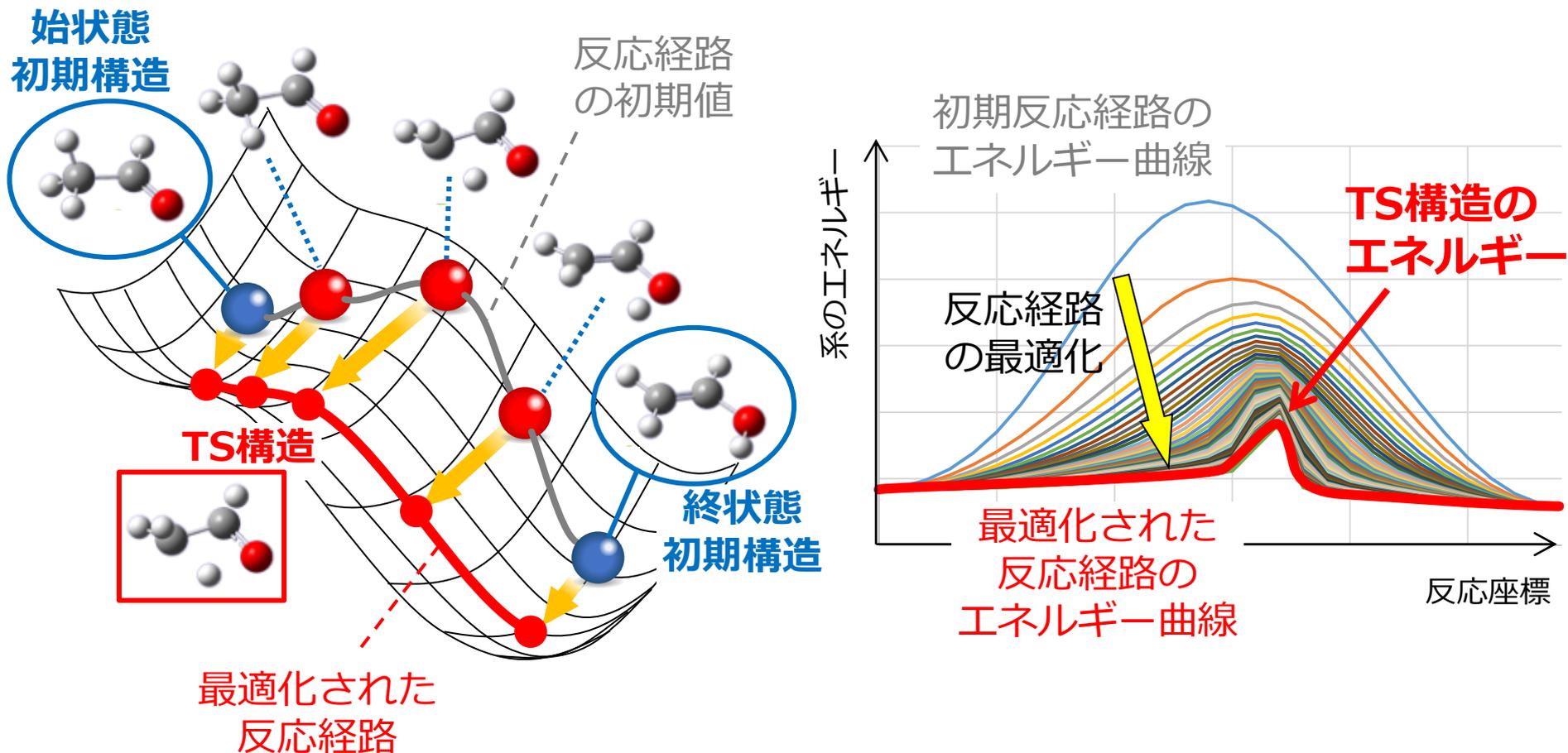
- PM6法を高速化し、上記計算時間を実現
- 一般的な有機化学反応なら、精査計算により正確なTS構造を求めることが可能

➤ 70サイト以上・100名以上のユーザが利用

- 大学・公的機関 52機関、企業 23社が本ソフトを利用（2020年6月現在）

Reaction plus の基本原理

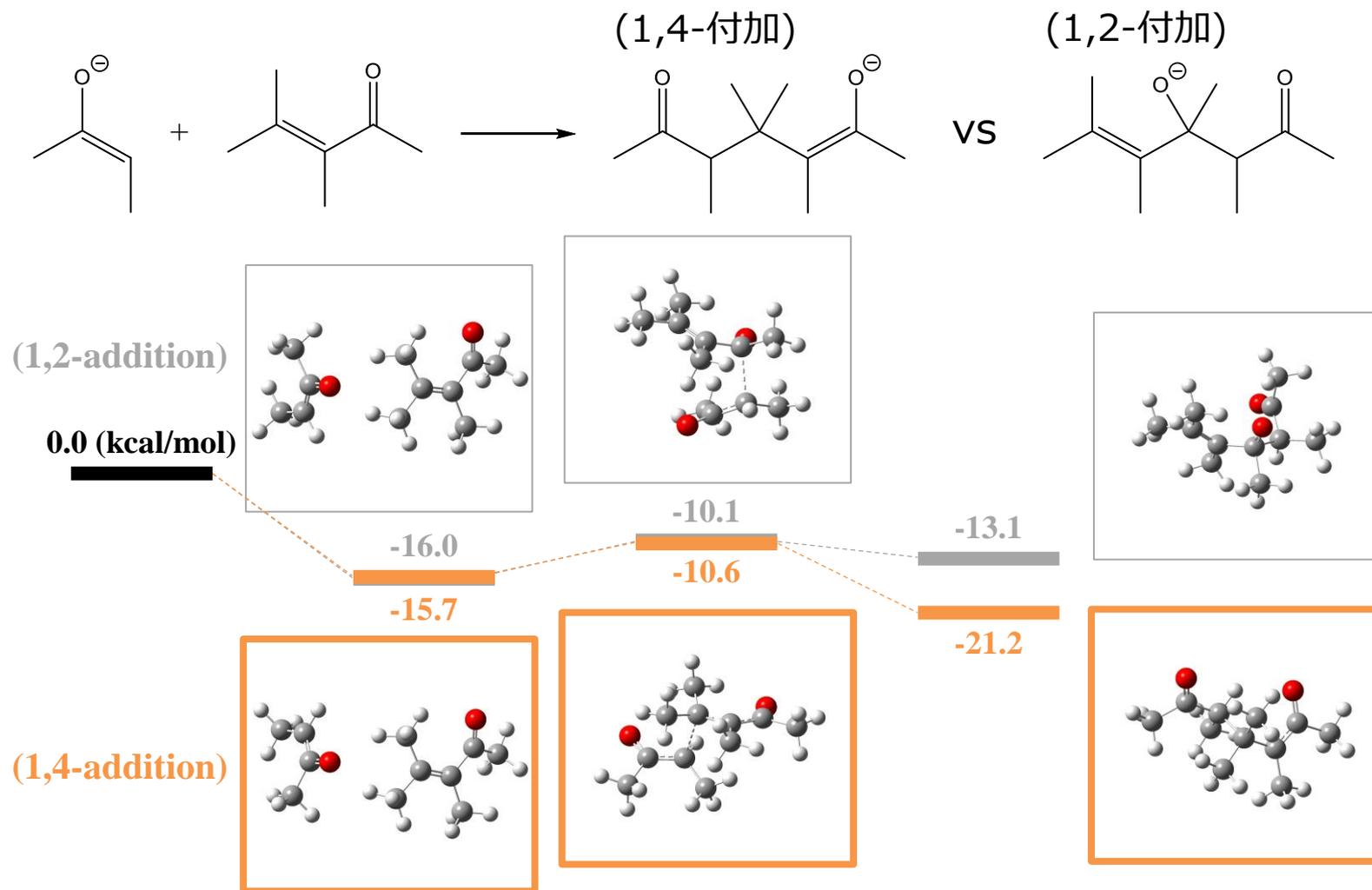
改良 nudged elastic band (NEB) 法を用いて反応経路を最適化



Reaction plus 適用反応例リスト

反応の種類	反応例	Pro	Ex	反応の特徴
求核付加反応	Michael付加反応	○	○	位置選択性
環化付加反応	Diels-Alder反応	○	○	立体選択性
	阪大井川先生ら・ベンザインとアジドの[3+2]環化付加反応	○	○	位置選択性
	都立大平林先生ら・Sn触媒によるアリルスルフィド環化付加反応	○	○	典型金属・カルコゲン
挿入反応	京大石田先生ら・紫外線照射によるCO ₂ 固定化反応	○	○	環化付加反応
	京大辻先生ら・Cu触媒によるCO ₂ 固定化反応	○	△	遷移金属
求電子置換反応	Kolbe-Schmitt反応	○	○	位置選択性
転位反応	Beckmann転位反応	○	○	置換基の転位能差
カップリング反応	Mizoroki-Heck反応	○	○	遷移金属・cis-trans選択性
	Migita-Kosugi-Stille反応におけるトランスメタル化	○	○	遷移金属・トランスメタル化
	Gorelsky <i>et al.</i> ・Pd触媒クロスカップリング反応	○	○	遷移金属・位置選択性
メタセシス反応	Wittig反応	○	○	リンイリド
開裂・分解反応	Frey <i>et al.</i> ・一置換シクロブテン開裂反応	○	○	cis-trans選択性
	早大杉村様ら・質量分析における <i>p</i> -ベンゾキノンの断片化過程	○	○	ラジカルカチオン
ラジカル反応	広島大安倍先生ら・ジラジカル分子のホモリティック閉環反応	○	×	開殻一重項状態・開殻→閉殻反応
典型元素反応	東大内山先生ら・ホウ素亜鉛アート錯体の発生	○	×	ホウ素-ホウ素結合開裂・典型金属
	東北大岩本先生ら・Siクラスター異性化反応	○	×	異性化反応・典型元素クラスター
形式的分子内反応	理研イリエシュ先生ら・亜鉛触媒によるインドール合成反応	○	×	典型金属
	分子研榎山先生ら・エン-アルジミンの形式的転位反応	○	—	複雑な多段階反応
不均一反応	酸化亜鉛表面上のギ酸分解過程	○	×	金属酸化物
その他の反応	名大忍久保先生ら・Pdノルコロールの「お椀」反転	○	○	お椀型π分子の反転
	京大村田先生ら・Ar原子のフラーレンへの内包過程	○	×	原子内包フラーレン・分子手術

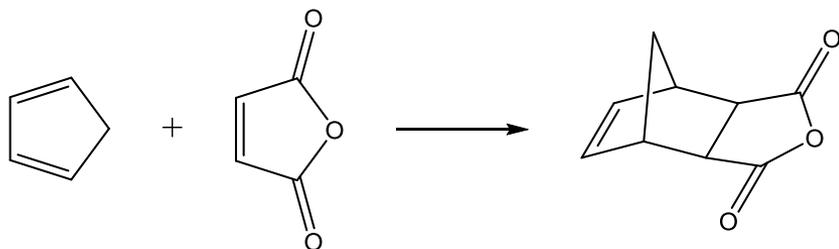
Michael付加反応



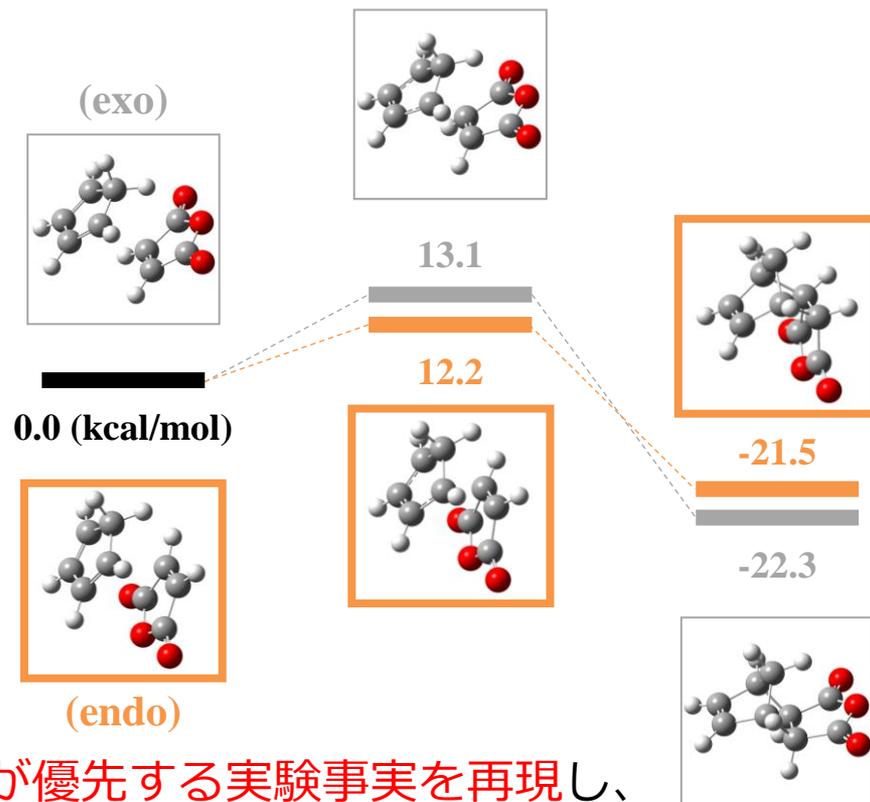
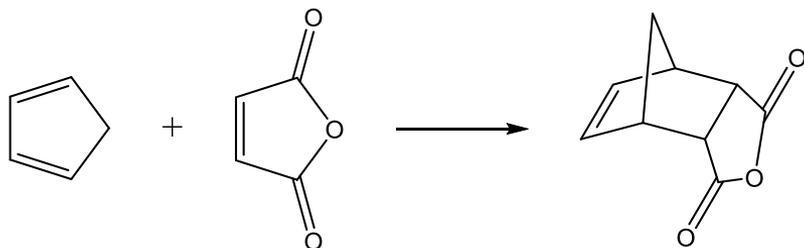
1,4-付加が起こる実験事実を再現し、その選択性が熱力学的要因に依ることを説明

Diels-Alder反応

(exo反応)



(endo反応)



常温ではendo反応が優先する実験事実を再現し、
その選択性を速度論的に説明

Diels-Alder反応

活性化エネルギーの計算値と実測値

計算値	実測値*
12.2 kcal/mol	11.4 kcal/mol

*1,3-シクロヘキサジエンと無水マレイン酸のDiels-Alder反応
R. A. Grieger, C. A. Eckert, J. Am. Chem. Soc. 92, 7149 (1970)

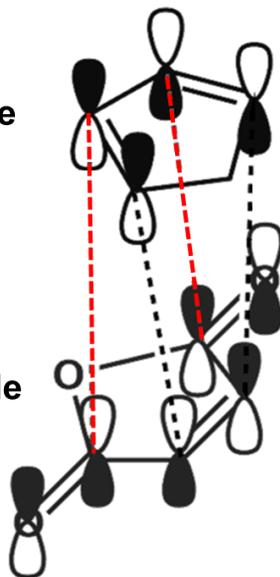
(exo反応)



cyclopentadiene
HOMO

maleic anhydride
LUMO

(endo反応)



各TS構造のNICS値・ χ 値・ Λ 値

(これらの絶対値が大きいほど二次軌道相互作用が大きい)

	NICS (ppm)	分子磁化率 χ (cgs ppm)	分子磁化率高揚 Λ (cgs ppm)
exo型TS	-17.88	-81.92	-10.16
endo型TS	-18.21	-83.60	-12.62

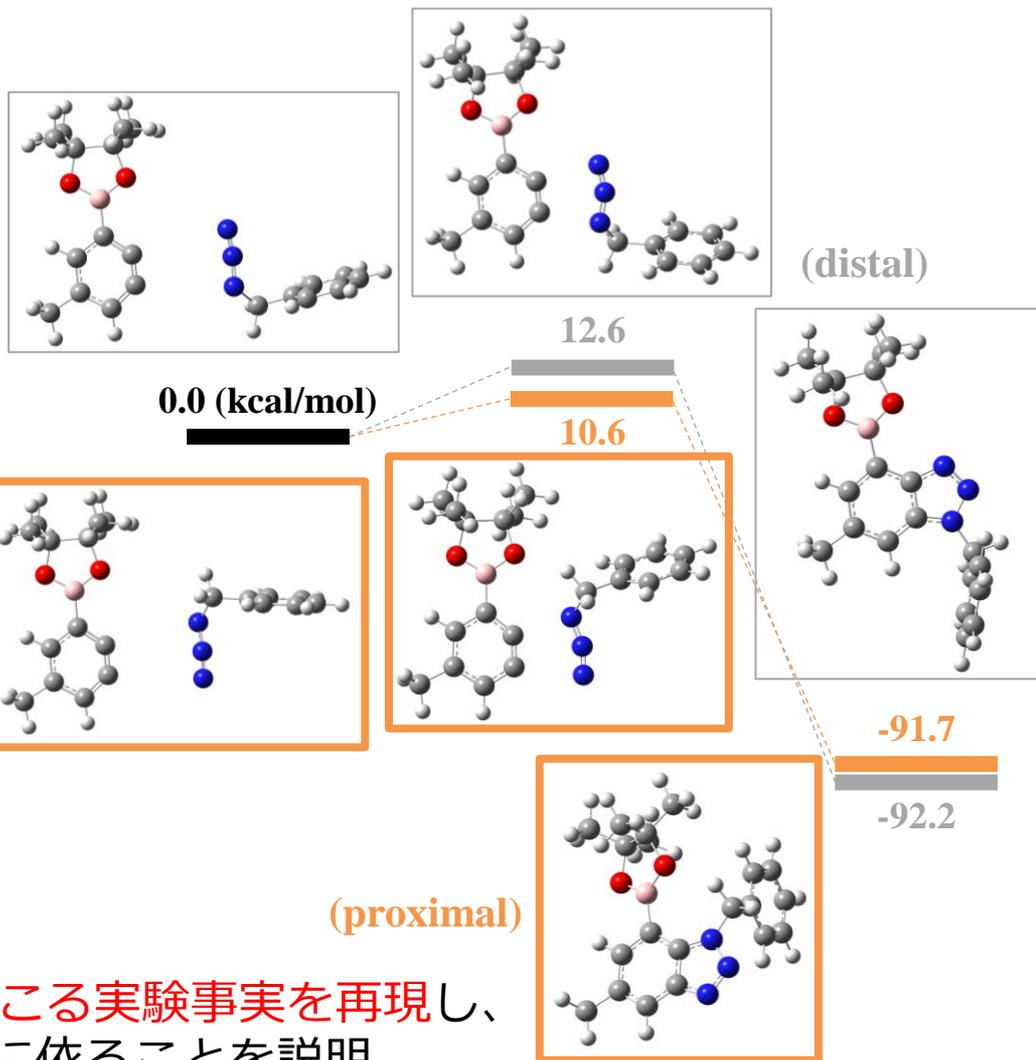
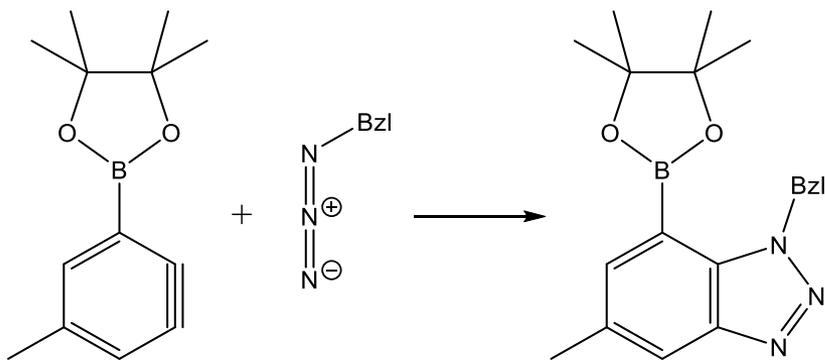
endo選択性を二次軌道相互作用 (赤破線) により説明
NICS・ χ ・ Λ の絶対値もendo型TSの方が大きくなっている

環化付加反応例(2)

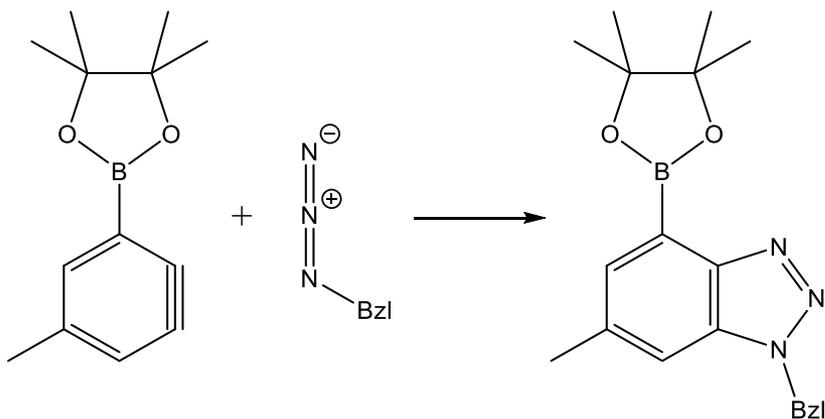
阪大井川先生・環化付加反応

T. Ikawa, H. Tokiwa, S. Akai, *J. Synth. Org. Chem. Jpn.* 70, 1123 (2012)

(proximal付加)



(distal付加)

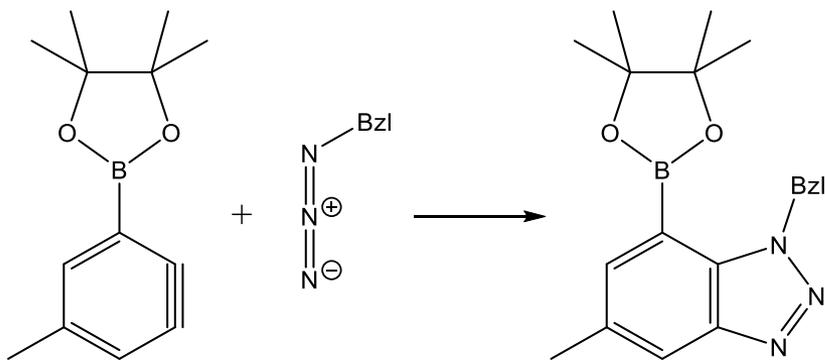


proximal付加が優先的に起こる実験事実を再現し、
その選択性が速度論的要因に依ることを説明

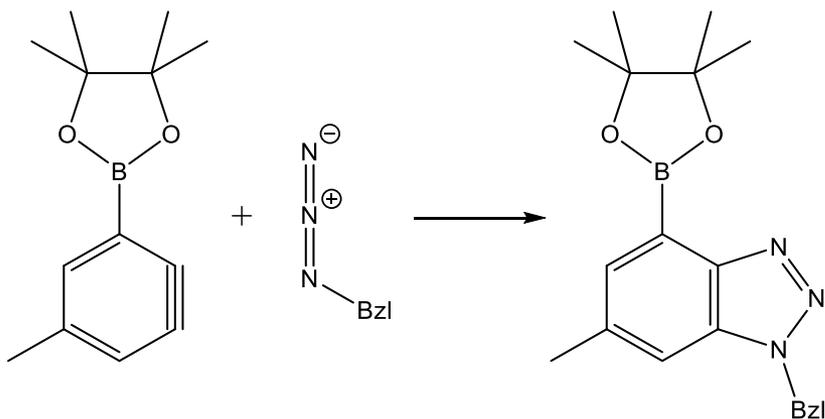
阪大井川先生・環化付加反応

T. Ikawa, H. Tokiwa, S. Akai, *J. Synth. Org. Chem. Jpn.* 70, 1123 (2012)

(proximal付加)



(distal付加)



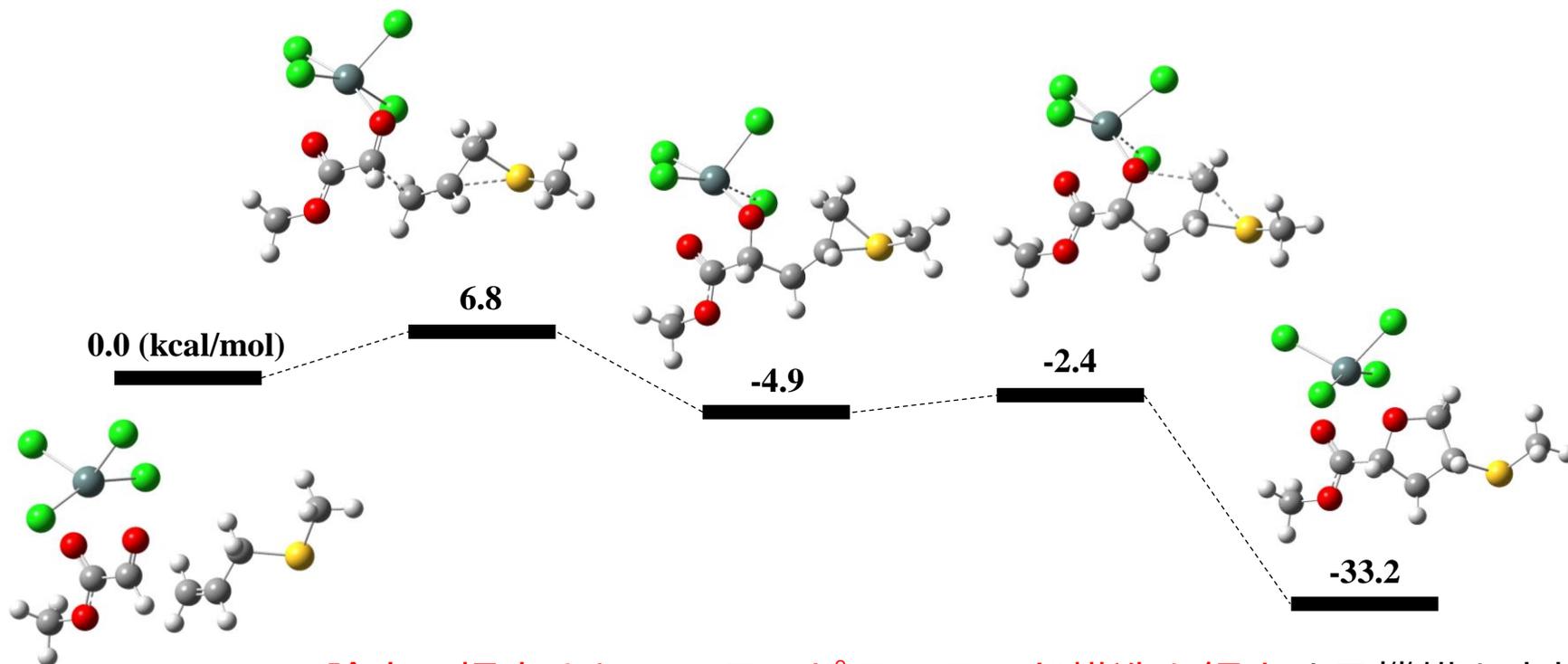
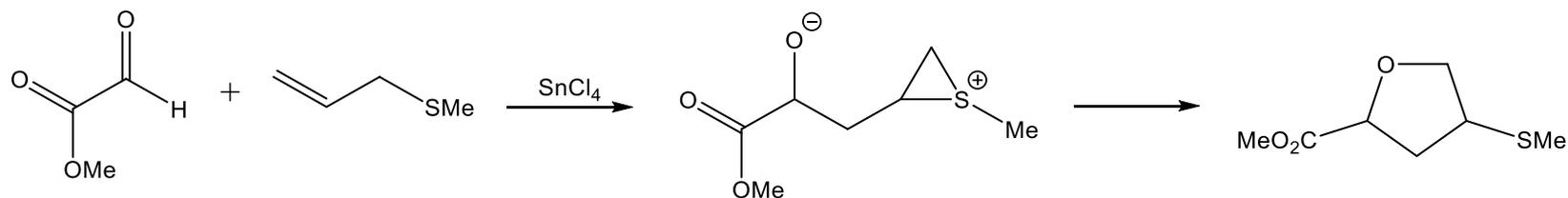
proximal体:distal体の生成比(@0°C)

計算値	実測値
40 : 1	>50 : 1

proximal付加の選択性を計算でも再現

環化付加反応例(3)

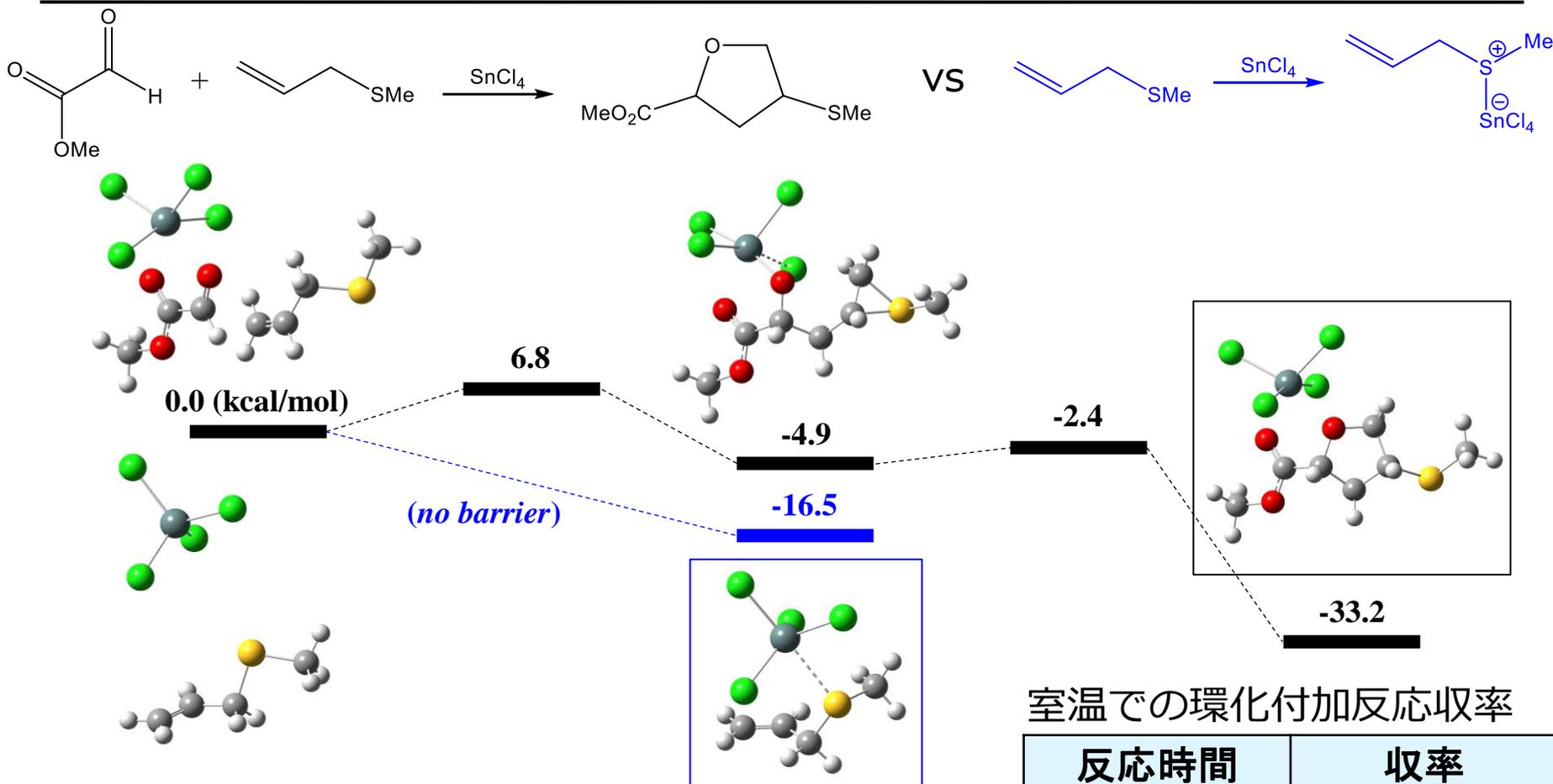
都立大平林先生・環化付加反応

K. Hirabayashi, H. Sato, Y. Kuriyama, J. Matsuo, S. Sato, T. Shimizu, N. Kamigata, *Chem. Lett.* 36, 826 (2007)

論文で提案されているエピスルフィド構造を経由する機構を支持

環化付加反応例(3)

都立大平林先生・環化付加反応

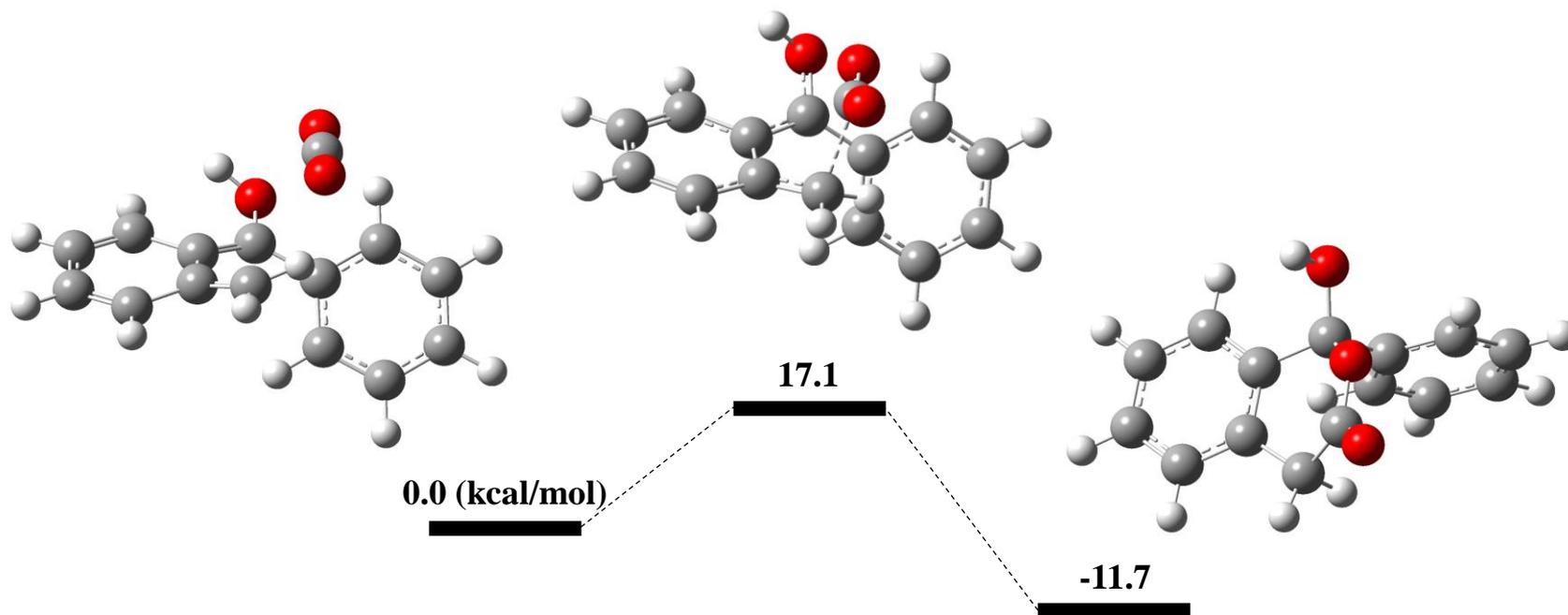
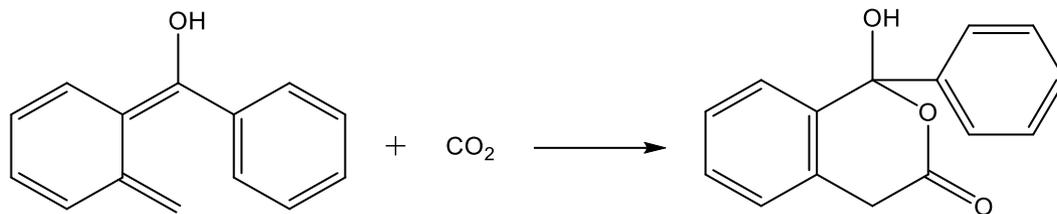
K. Hirabayashi, H. Sato, Y. Kuriyama, J. Matsuo, S. Sato, T. Shimizu, N. Kamigata, *Chem. Lett.* 36, 826 (2007)

室温での環化付加反応収率

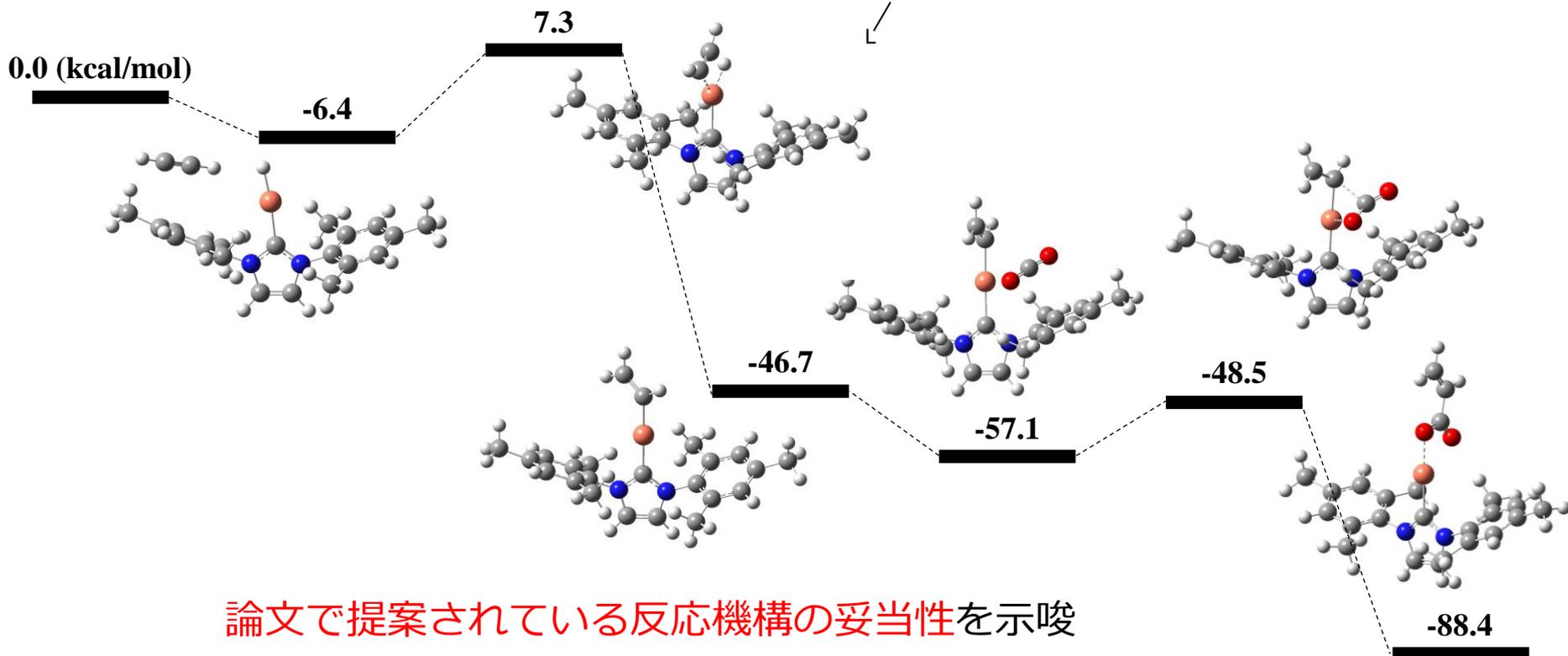
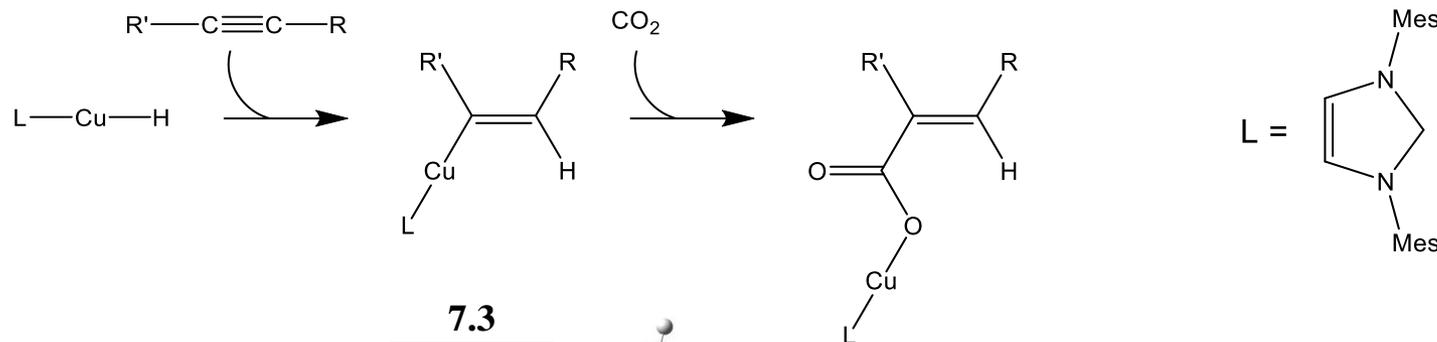
反応時間	収率
1h	18%
18h	30%

スルフィド-Sn触媒複合体形成の経路と競合するため、
メチルスルフィド分子での環化付加反応は進みにくい
実験事実を再現

挿入反応例(1)

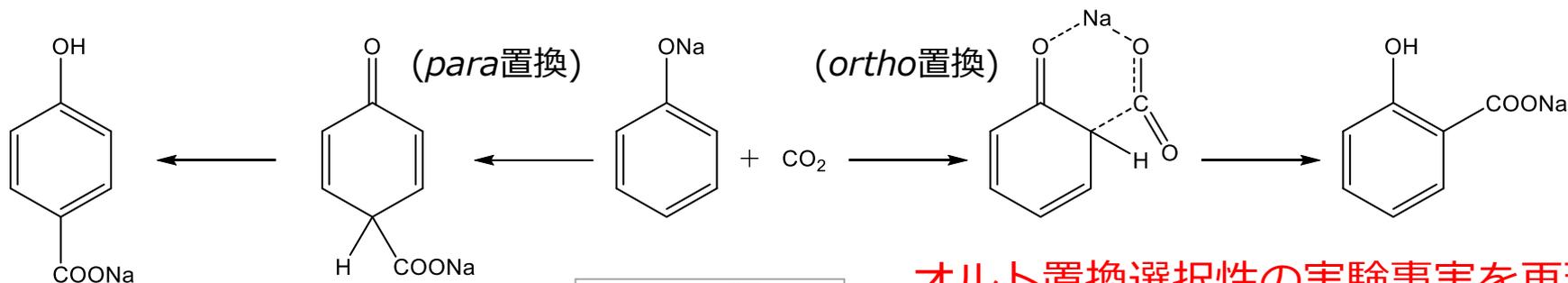
京大石田先生・CO₂固定化反応Y. Masuda, N. Ishida, M. Murakami, *J. Am. Chem. Soc.* 137, 14063 (2015)室温でのCO₂固定化の実験事実を合理的に説明

挿入反応例(2)

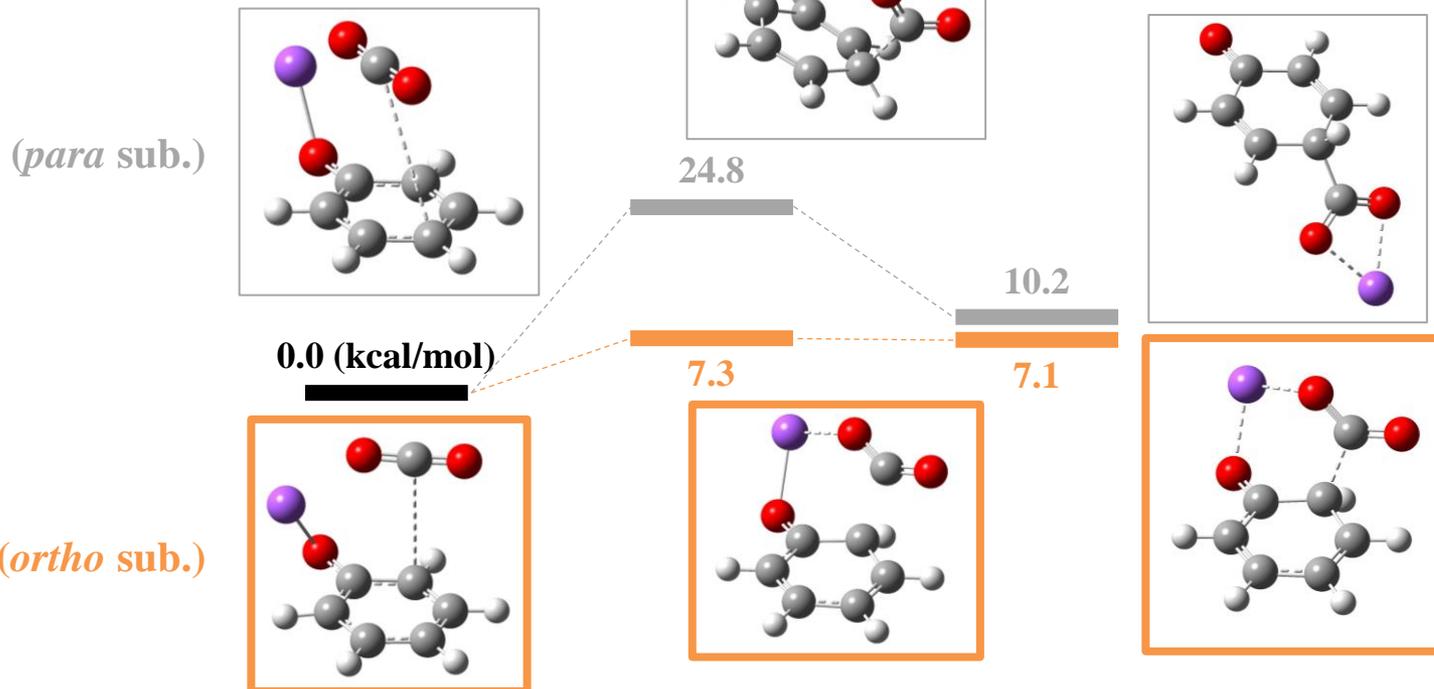
京大辻先生・CO₂固定化反応T. Fujihara, T. Xu, K. Semba, J. Terao, Y. Tsuji, *Angew. Chem. Int. Ed.* 50, 523 (2011)

論文で提案されている反応機構の妥当性を示唆

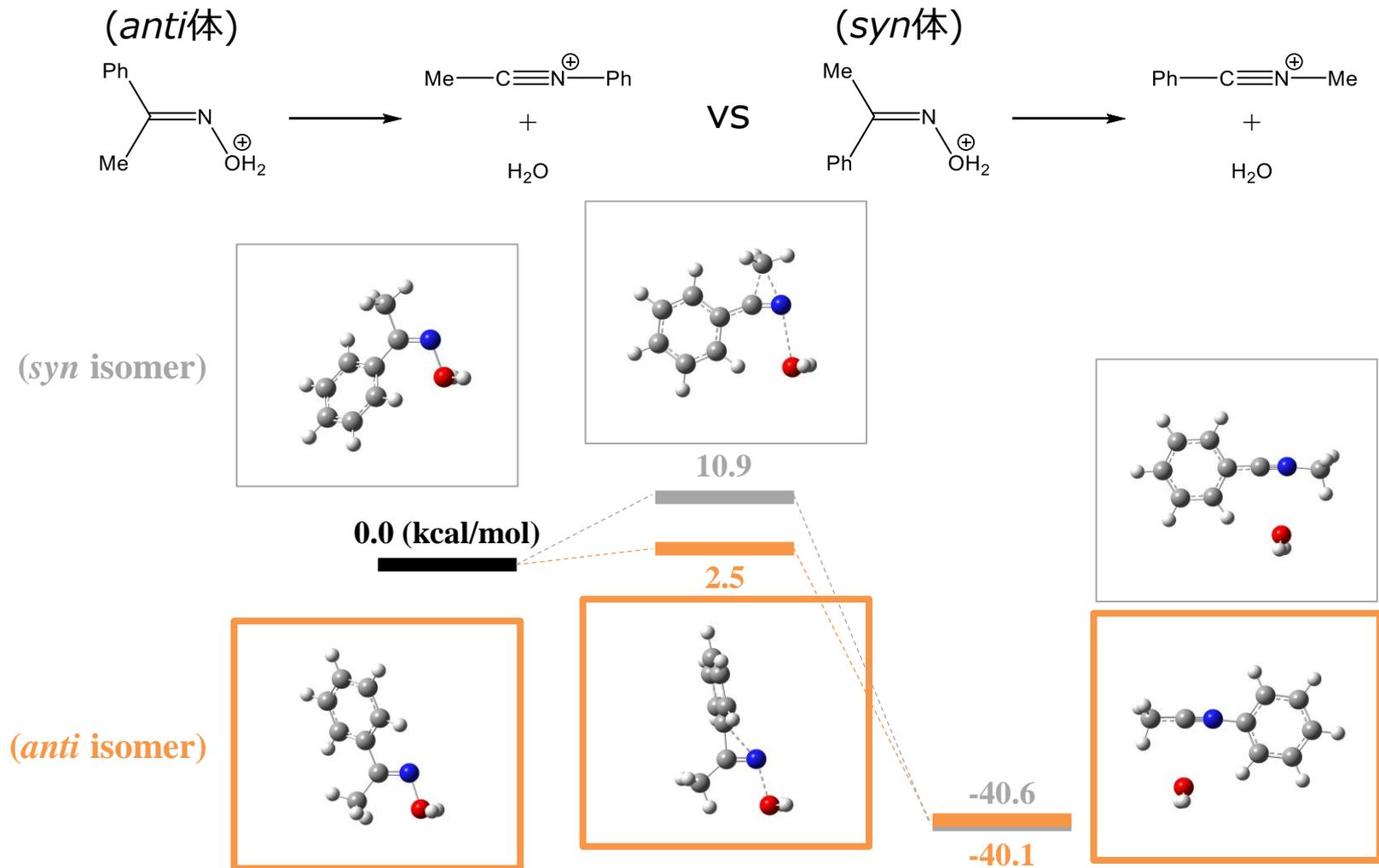
Kolbe-Schmitt反応



オルト置換選択性の実験事実を再現し、反応中間体の安定性により説明



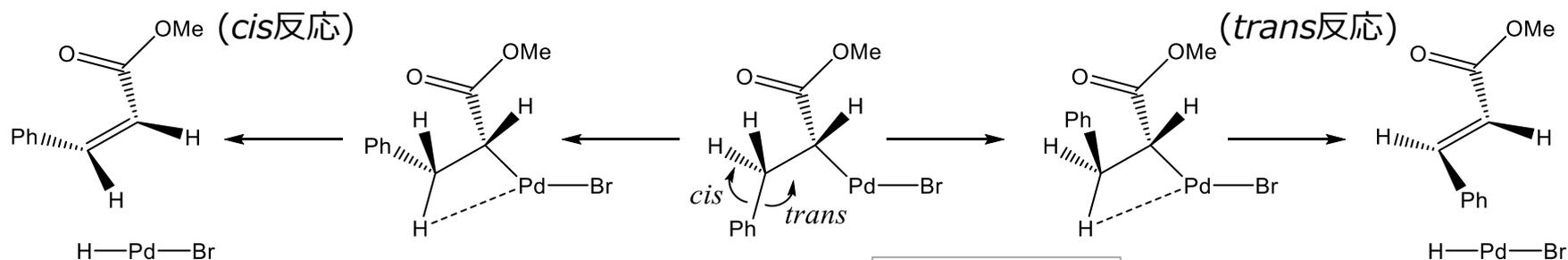
Beckmann転位反応



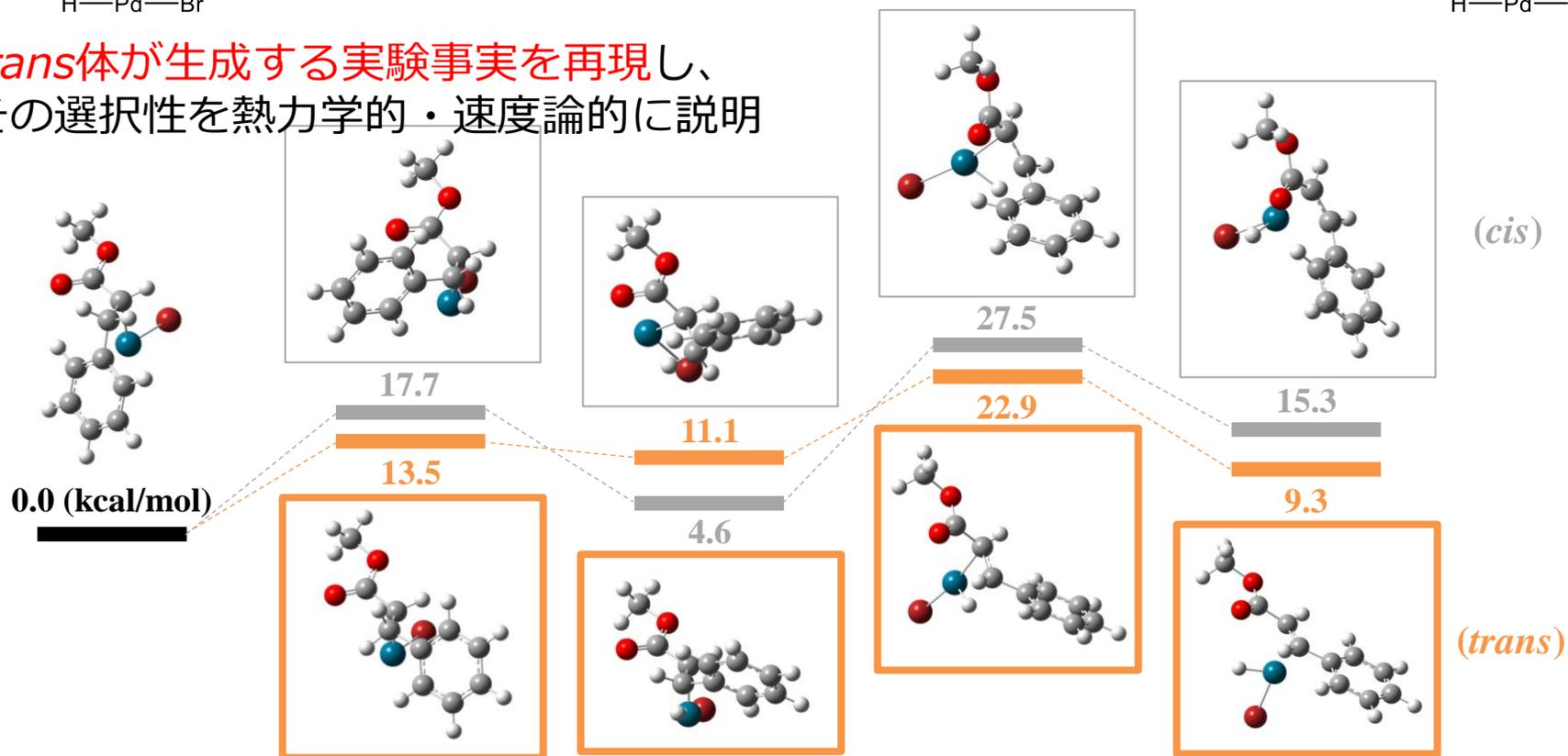
アリール基転位 > アルキル基転位の実験事実を再現し、その選択性を速度論的に説明

カップリング反応例(1)

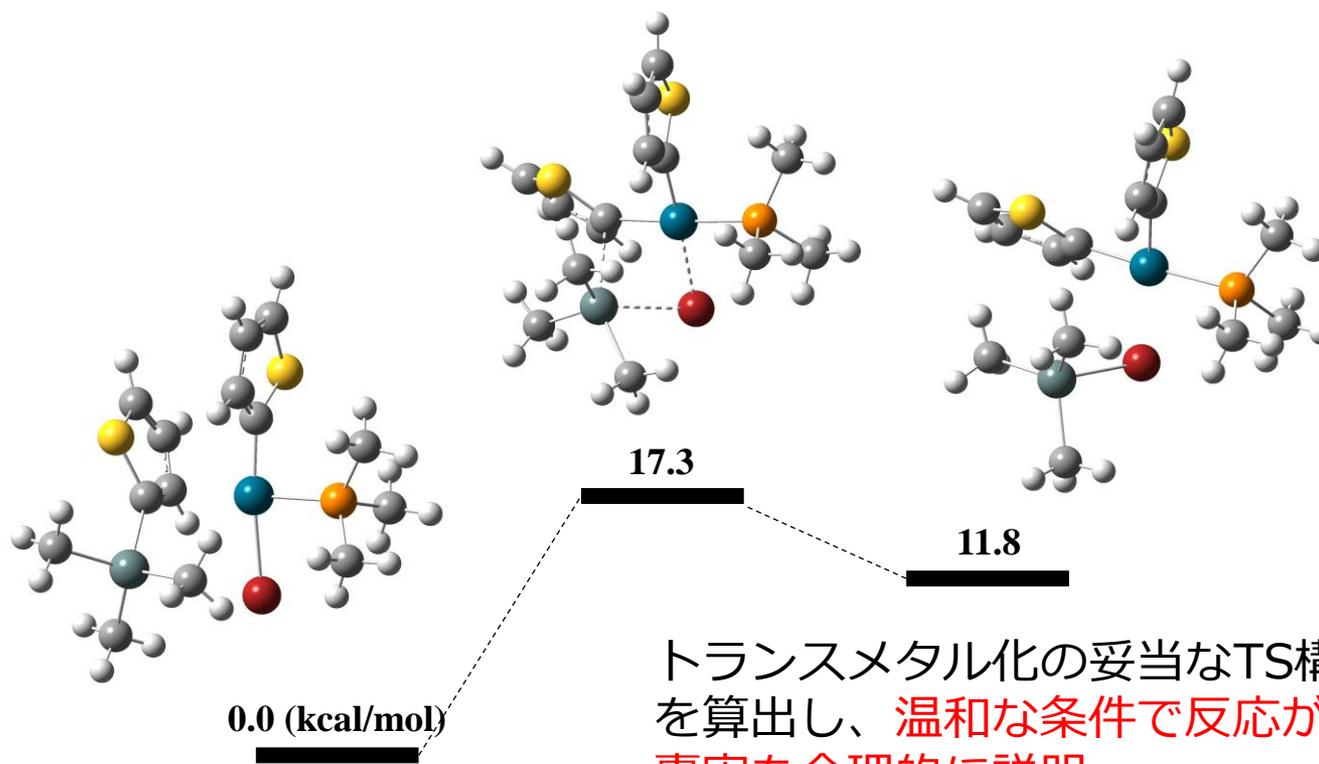
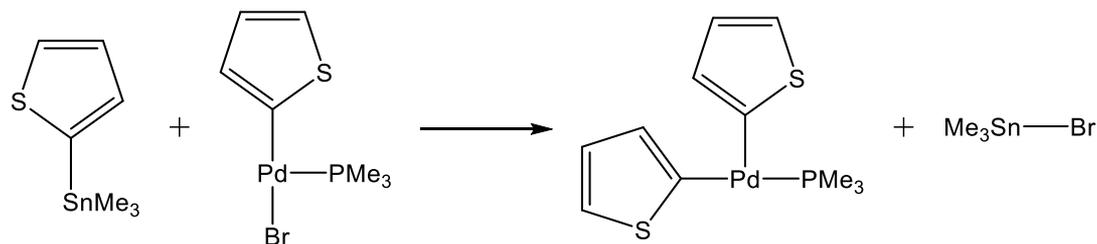
Mizoroki-Heck反応



*trans*体が生成する実験事実を再現し、
その選択性を熱力学的・速度論的に説明



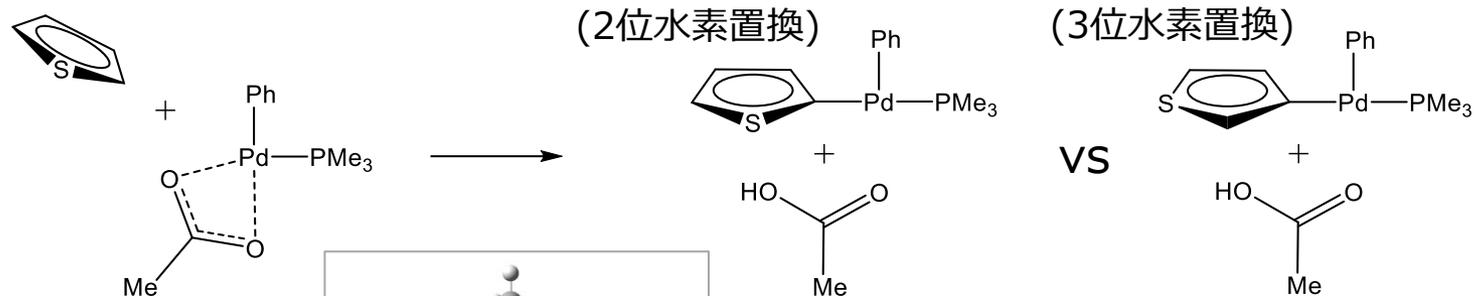
Migita-Kosugi-Stille反応



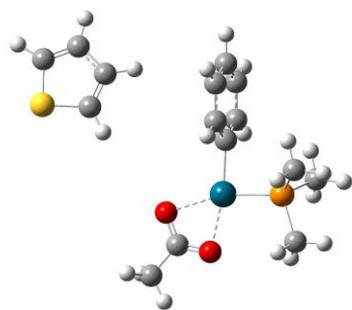
トランスメタル化の妥当なTS構造と反応障壁を算出し、**温和な条件で反応が進行する実験事実を合理的に説明**

カップリング反応例(3)

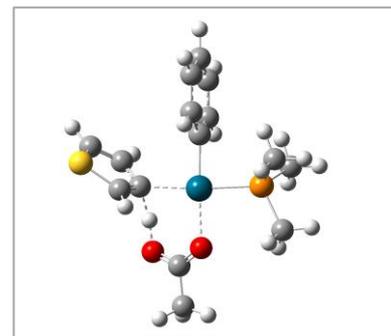
Gorelsky · Pd触媒クロスカップリング

S. I. Gorelsky, D. Lapointe, K. Fagnou, *J. Am. Chem. Soc.* 130, 10848 (2008), *J. Org. Chem.* 77, 658 (2012)

チオフェンの2位の
水素が置換される
実験事実を再現

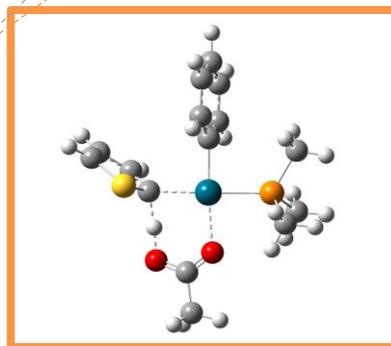


0.0 (kcal/mol)



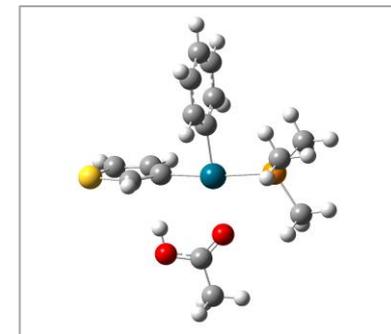
20.6

15.6



13.3

9.6

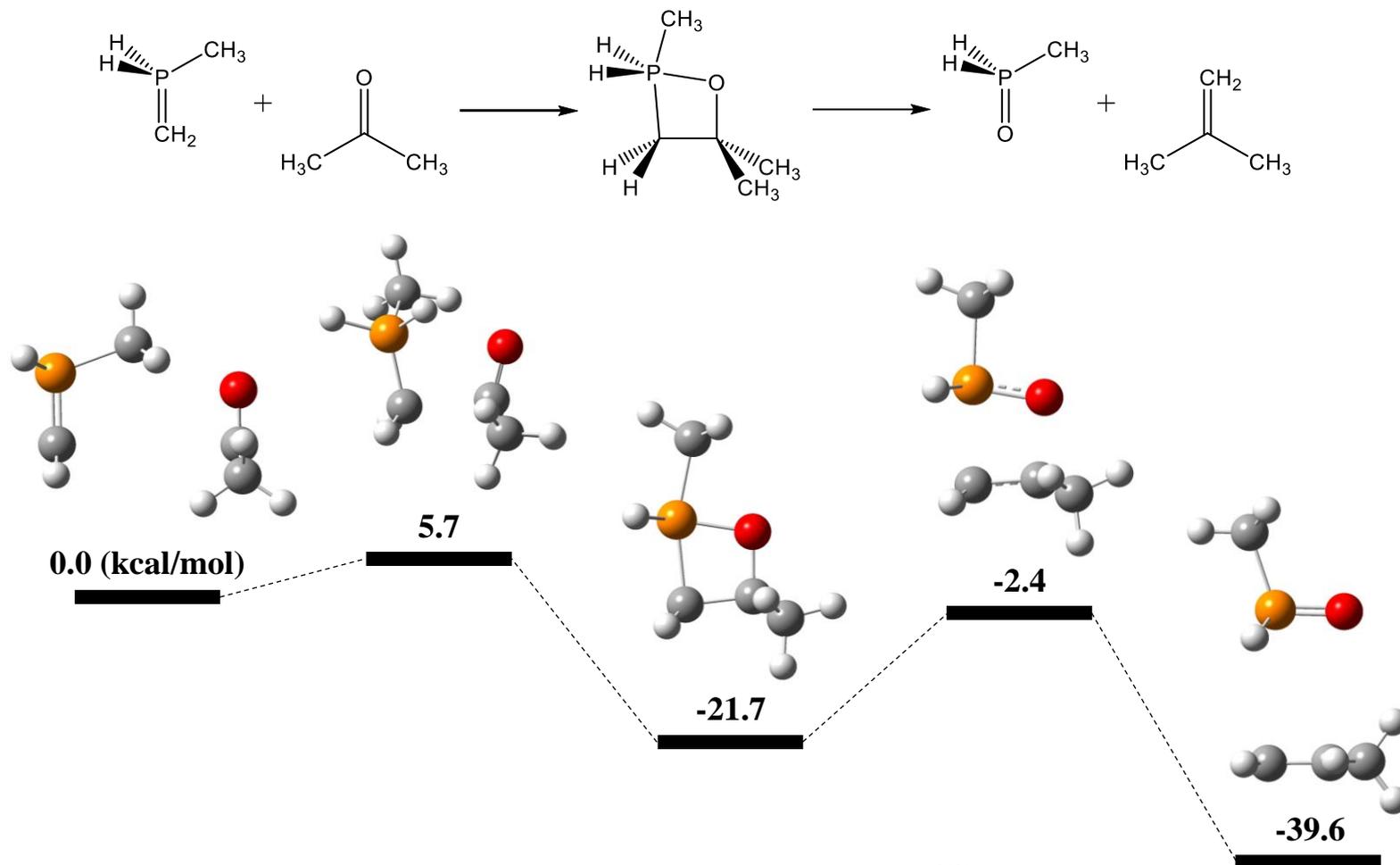


(3H sub.)



(2H sub.)

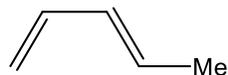
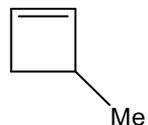
Wittig反応



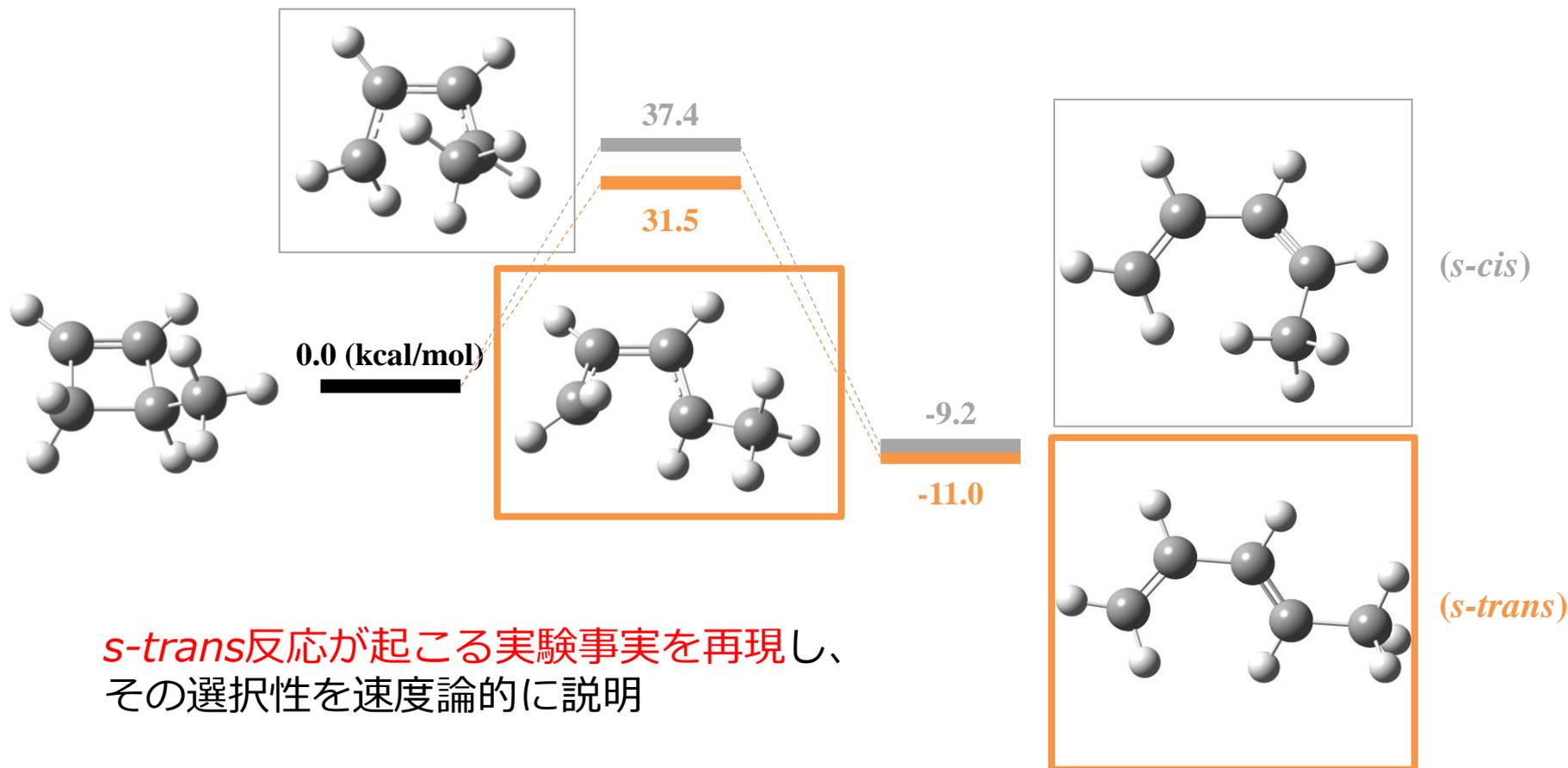
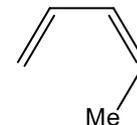
四員環構造の中間体を経由する反応機構を支持

開裂・分解反応例(1)

Frey・一置換シクロブテン開裂反応

H. M. Frey, D. C. Marshall, *Trans. Faraday Soc.* 61, 1715 (1965)W. R. Dolbier Jr., H. Koroniak, D. J. Burton, A. R. Bailey, G. S. Shaw, S. W. Hansen, *J. Am. Chem. Soc.* 106, 1871 (1984)*(s-trans*反応)*(s-cis*反応)

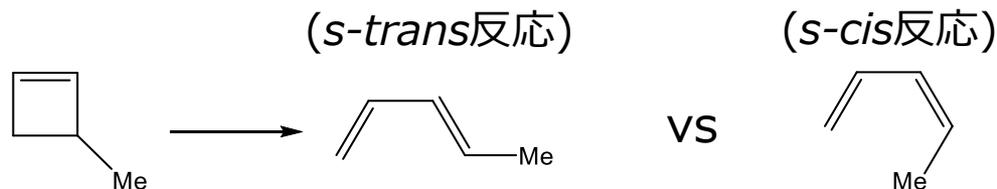
VS



*s-trans*反応が起こる実験事実を再現し、
その選択性を速度論的に説明

開裂・分解反応例(1)

Frey・一置換シクロブテン開裂反応

H. M. Frey, D. C. Marshall, *Trans. Faraday Soc.* 61, 1715 (1965)W. R. Dolbier Jr., H. Koroniak, D. J. Burton, A. R. Bailey, G. S. Shaw, S. W. Hansen, *J. Am. Chem. Soc.* 106, 1871 (1984)

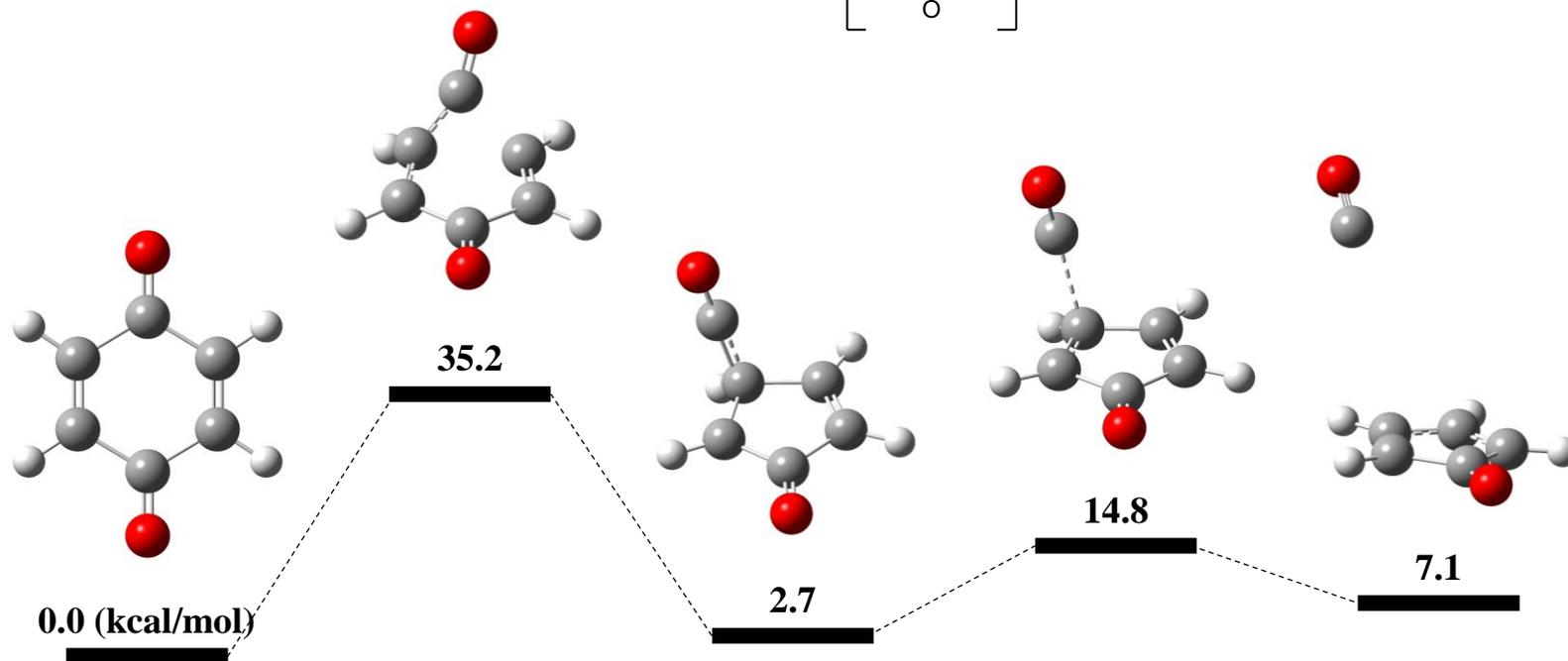
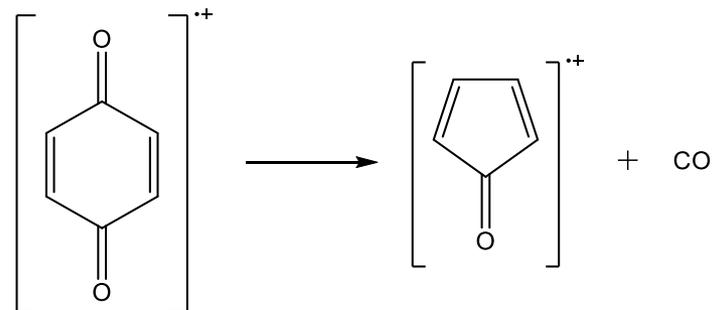
*s-trans*活性化エネルギー($\Delta H^{0\ddagger}$)と*s-cis*→*s-trans*活性化エネルギー差($\Delta\Delta H^{0\ddagger}$)の計算値と実測値

	計算値	実測値
$\Delta H^{0\ddagger}(trans)$	31.5 kcal/mol	31.6 kcal/mol*
$\Delta\Delta H^{0\ddagger}(cis-trans)$	5.9 kcal/mol	> 4 kcal/mol**

*Frey *et al.* **Dolbier *et al.*

活性化エネルギーの実測値を精度良く再現

開裂・分解反応例(2)

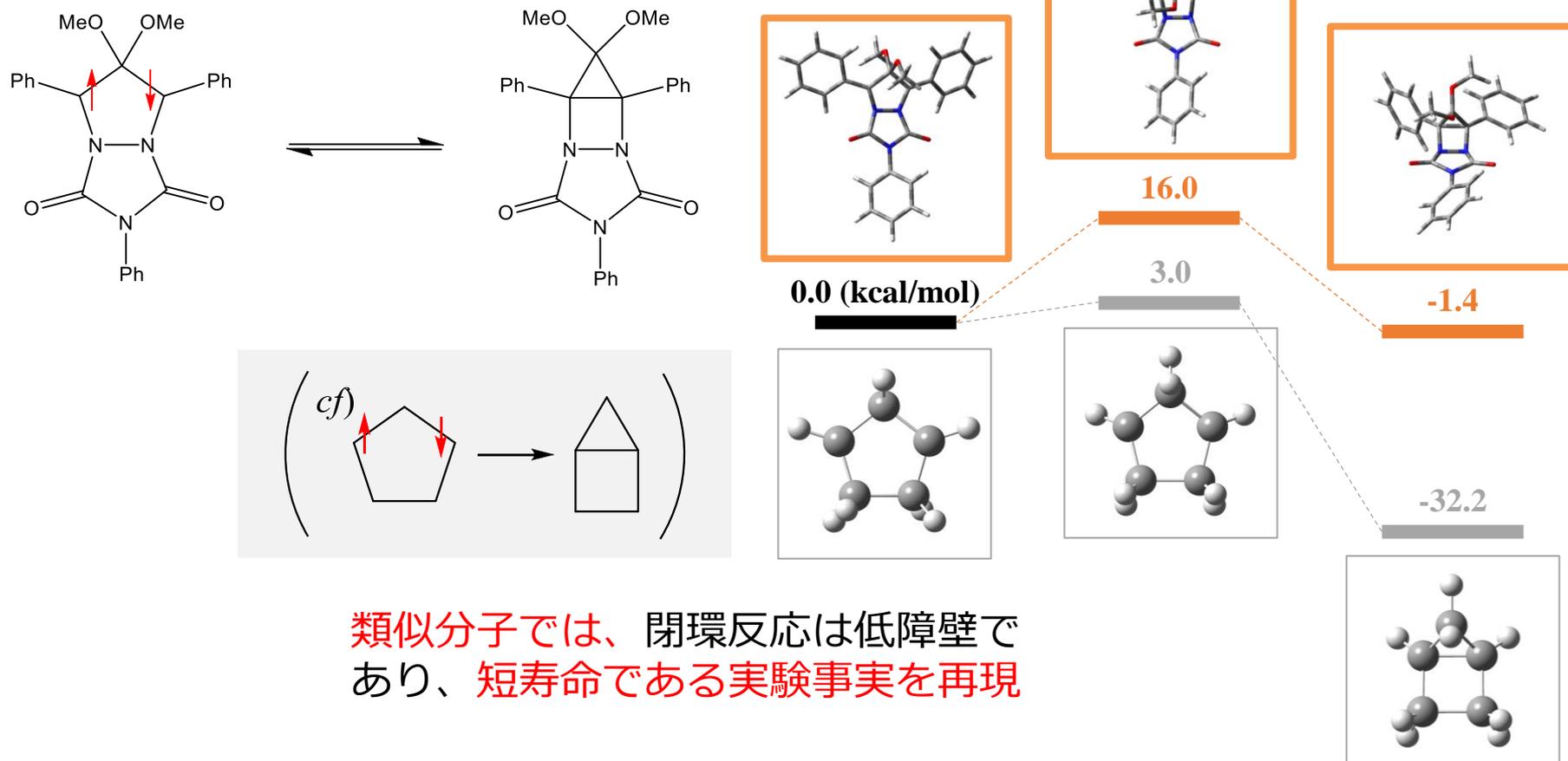
早大杉村様・*p*-ベンゾキノン⁺の断片化N. Sugimura, Y. Igarashi, R. Aoyama, T. Shibue, *Eur. J. Mass Spectrom.* 23, 40 (2017)

実験的に存在が示唆される五員環中間体を経由する分解機構を支持

広島大安倍先生・ジラジカル閉環反応

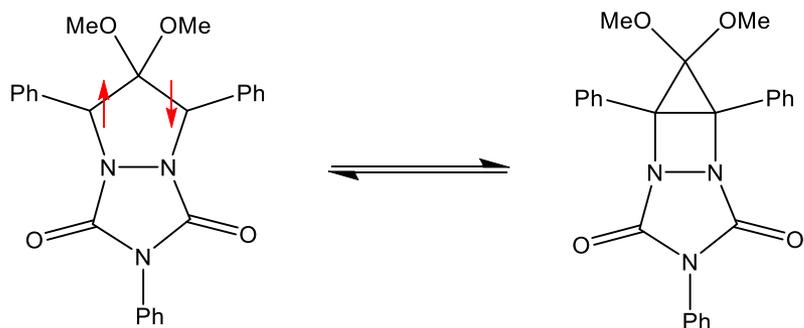
S. Yoshidomi, M. Abe, *J. Am. Chem. Soc.* 141, 3920 (2019)

ジラジカル分子の閉環反応に対する
速度論的長寿命性の実験事実を再現



広島大安倍先生・ジラジカル閉環反応

S. Yoshidomi, M. Abe, *J. Am. Chem. Soc.* 141, 3920 (2019)



活性化自由エネルギー ($\Delta G^{0\ddagger}$) の計算値
と実測値

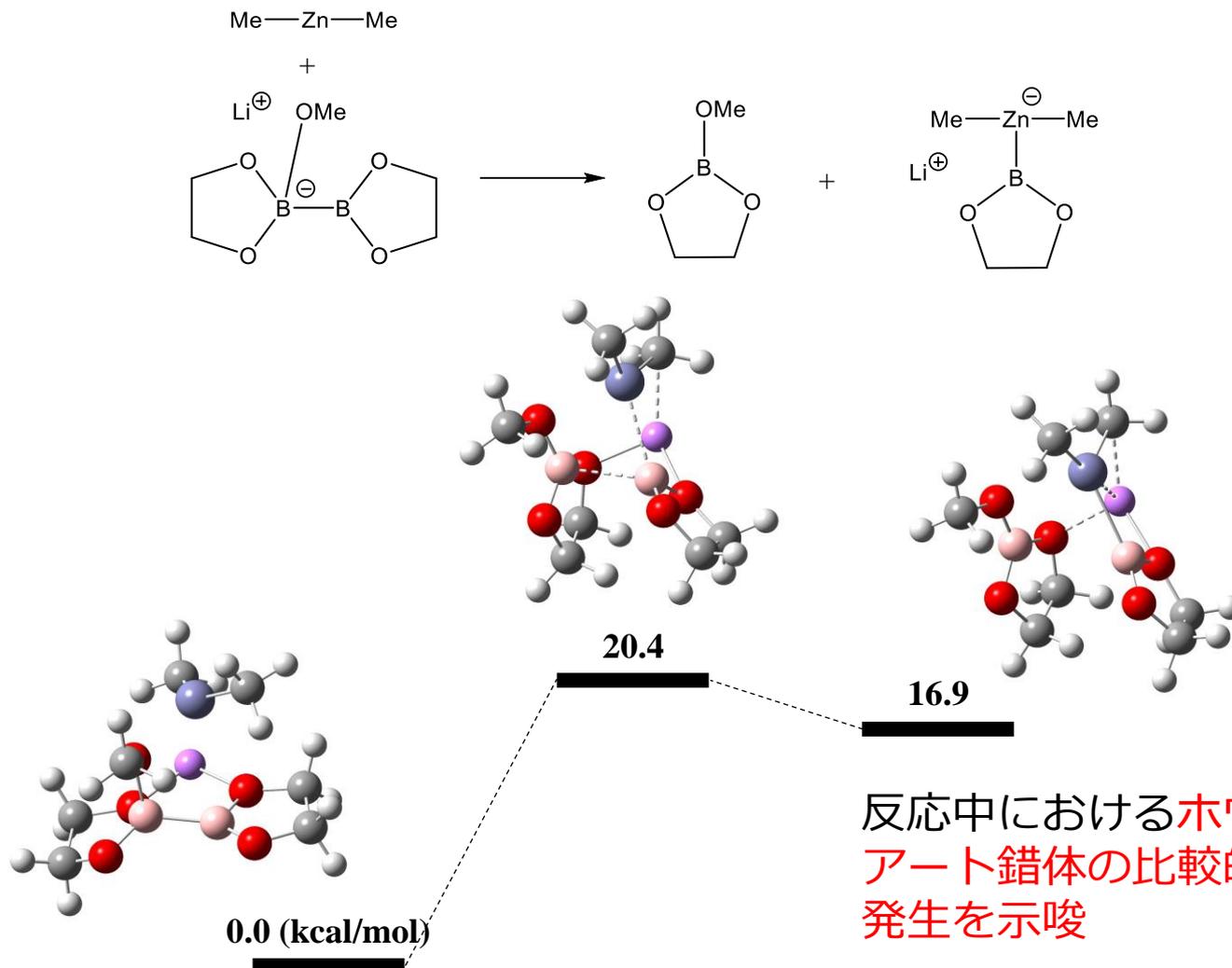
計算値	実測値
11.9 kcal/mol	9.2 kcal/mol

活性化エネルギーの実測値をほぼ再現

典型元素反応例(1)

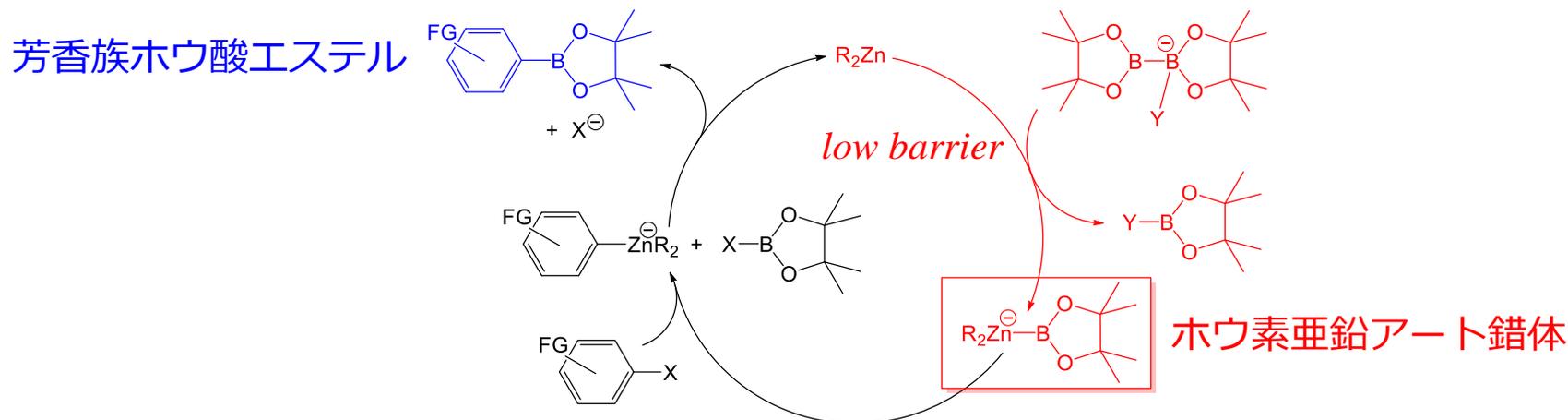
東大内山先生・ホウ素亜鉛アート錯体

Y. Nagashima, R. Takita, K. Yoshida, K. Hirano, M. Uchiyama, *J. Am. Chem. Soc.* 135, 18730 (2013)



典型元素反応例(1)

東大内山先生・ホウ素亜鉛アート錯体

Y. Nagashima, R. Takita, K. Yoshida, K. Hirano, M. Uchiyama, *J. Am. Chem. Soc.* 135, 18730 (2013)

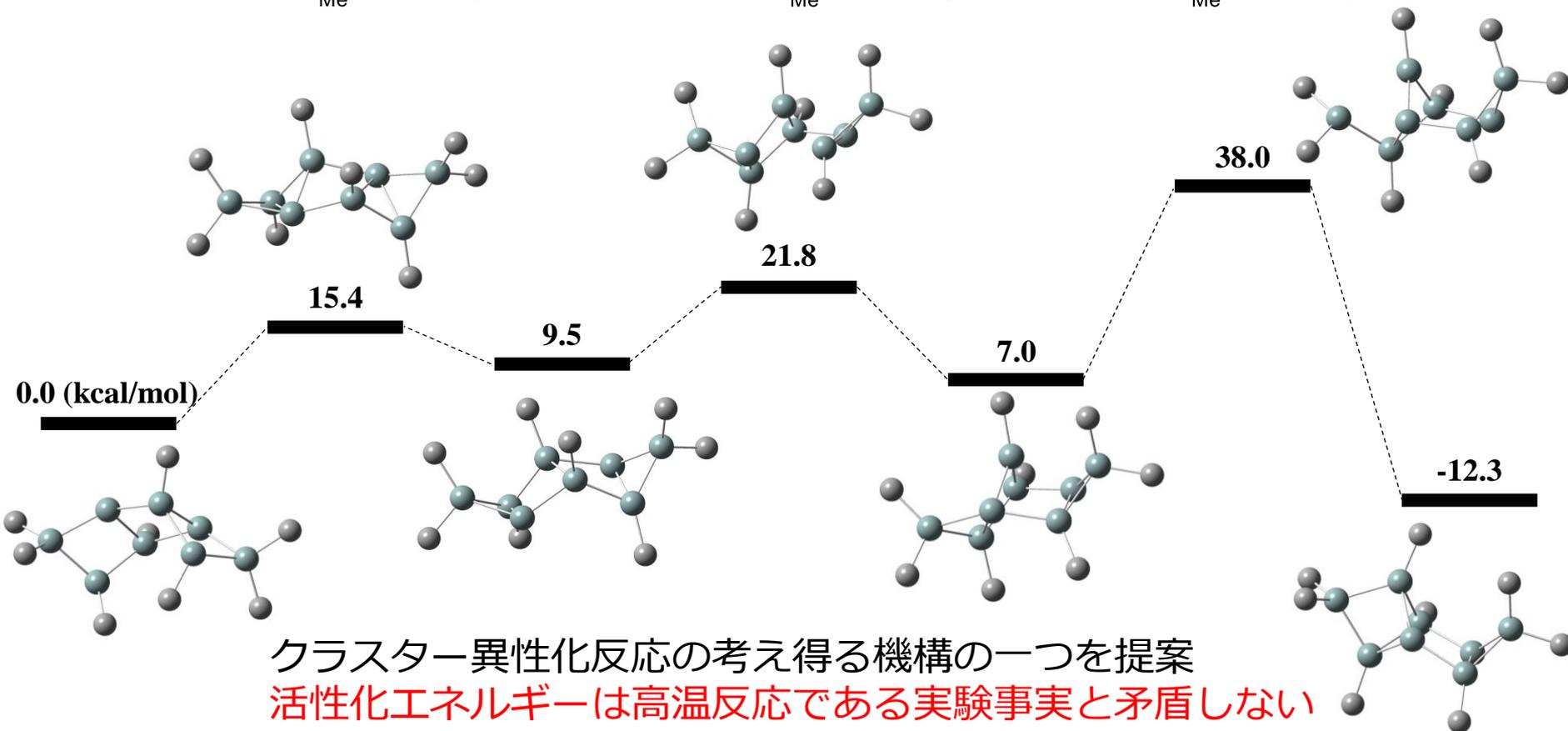
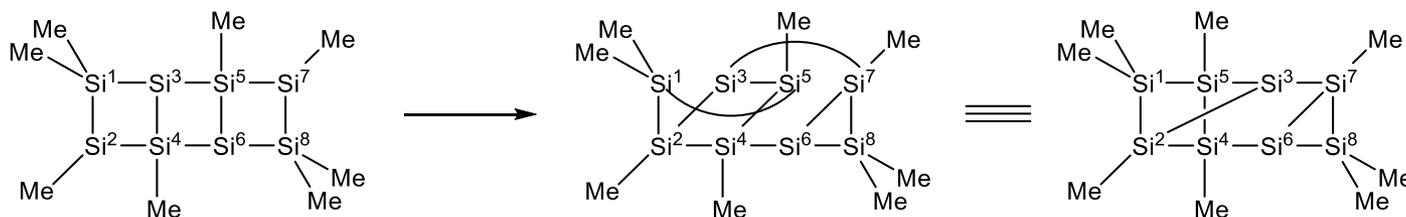
芳香族ホウ酸エステル生成の反応収率

生成物	収率	生成物	収率
Ph-Bpin	85%	<i>m</i> -F-Ph-Bpin	quant.
<i>m</i> -Tol-Bpin	86%	<i>p</i> -Cl-Ph-Bpin	92%
Mes-Bpin	80%	<i>p</i> -Br-Ph-Bpin	75%
<i>p</i> -MeO-Ph-Bpin	82%	<i>p</i> -CF ₃ -Ph-Bpin	92%
<i>m</i> -MeO-Ph-Bpin	91%	1-Np-Bpin	93%
<i>o</i> -MeO-Ph-Bpin	86%	2-Np-Bpin	72%

ホウ素亜鉛アート錯体発生
の計算結果と合致して
芳香族ホウ酸エステルの
効率的な合成が報告

東北大岩本先生・Siクラスター異性化

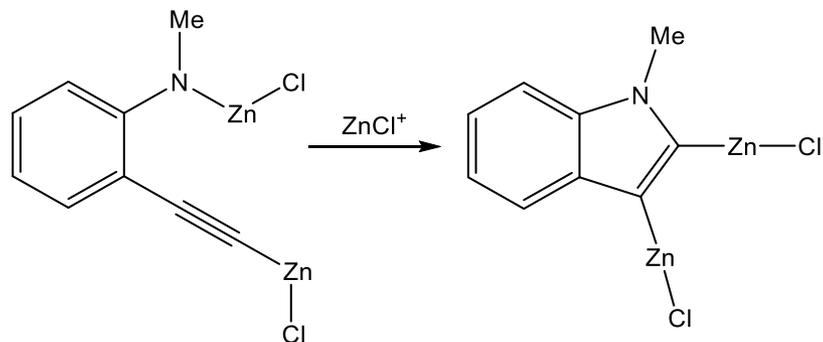
N. Akasaka, S. Ishida, T. Iwamoto, *Inorganics* 6, 107 (2018)



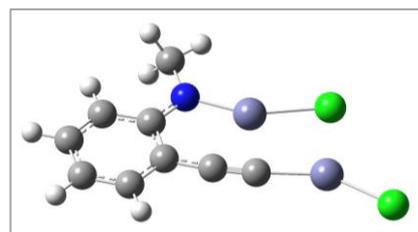
形式的分子内反応例(1)

理研Ilies先生・インドール合成反応

L. Ilies, M. Isomura, S. Yamauchi, T. Nakamura, E. Nakamura, *J. Am. Chem. Soc.* 139, 23 (2017)



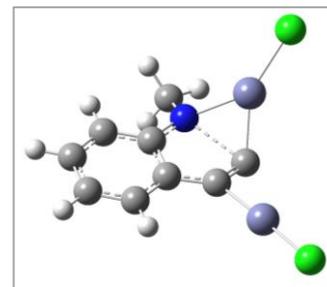
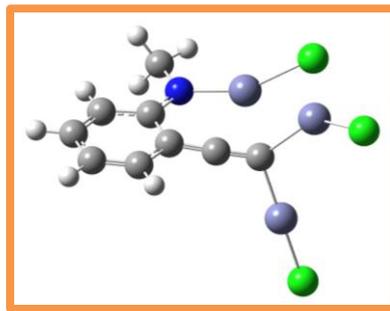
(A→B reaction)



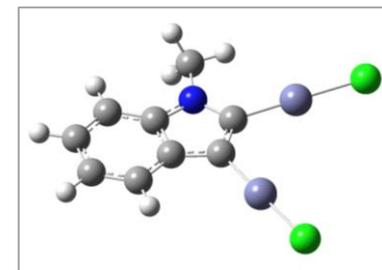
0.0 (kcal/mol)

形式的には分子内反応
だが、他の塩化亜鉛を
介する反応機構を示唆

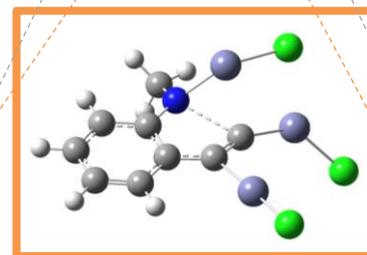
(A+C→B+C reaction)



44.0

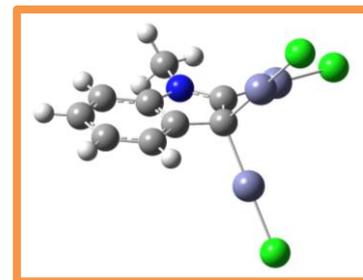


-1.4



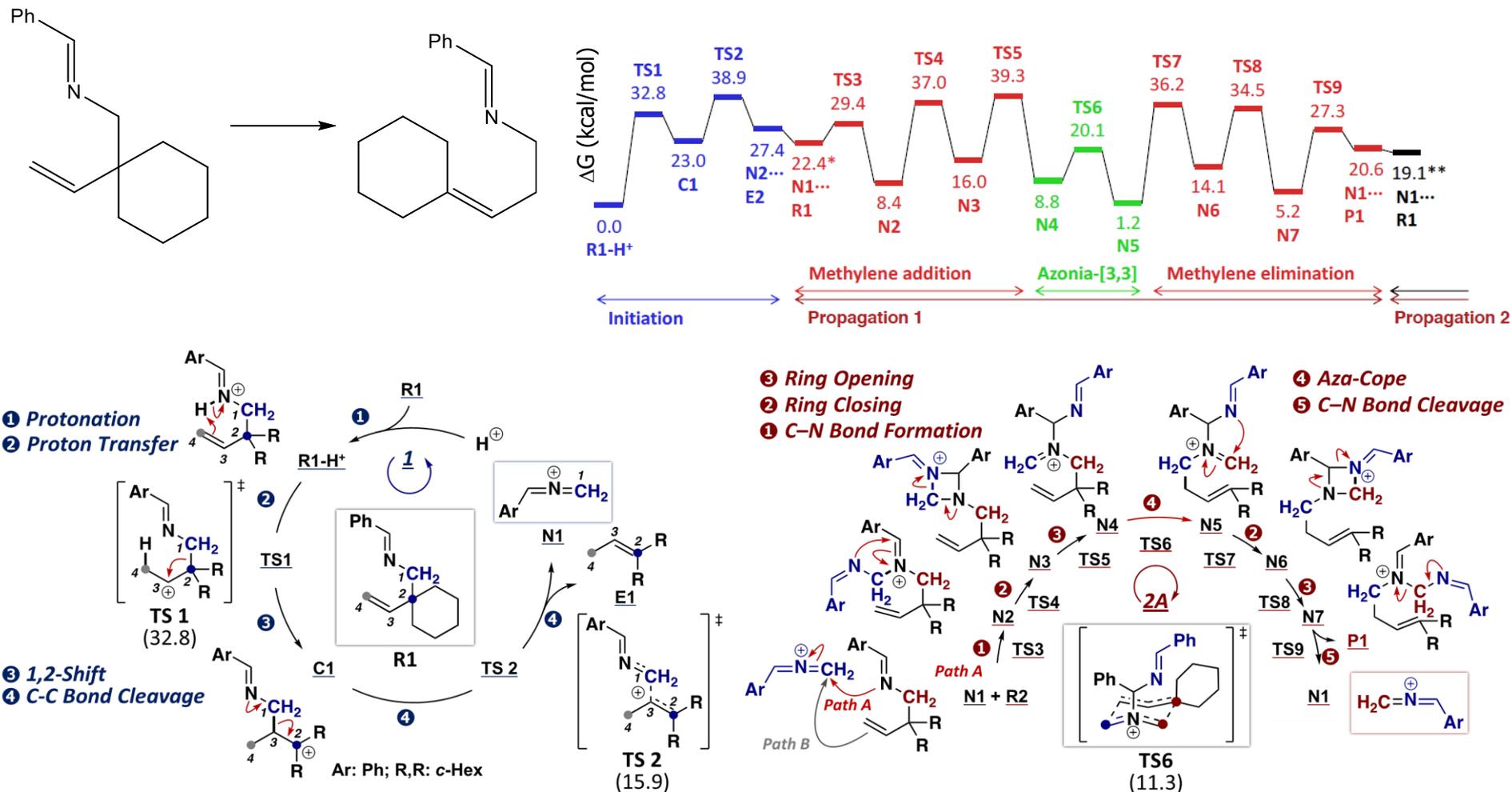
31.6

-9.4



形式的分子内反応例(2)

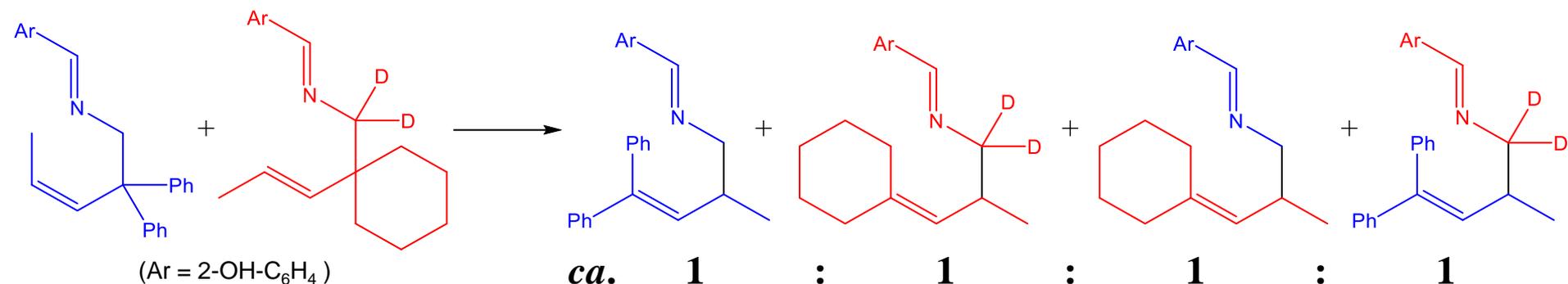
分子研榎山先生・形式的転位反応

C. Jongwohan, Y. Honda, T. Suzuki, T. Fujinami, K. Adachi, N. Momiyama, *Org. Lett.* 21, 4991 (2019)

形式的には分子内転位反応だが、実際には第三者分子が絡む複雑な多段階の反応機構

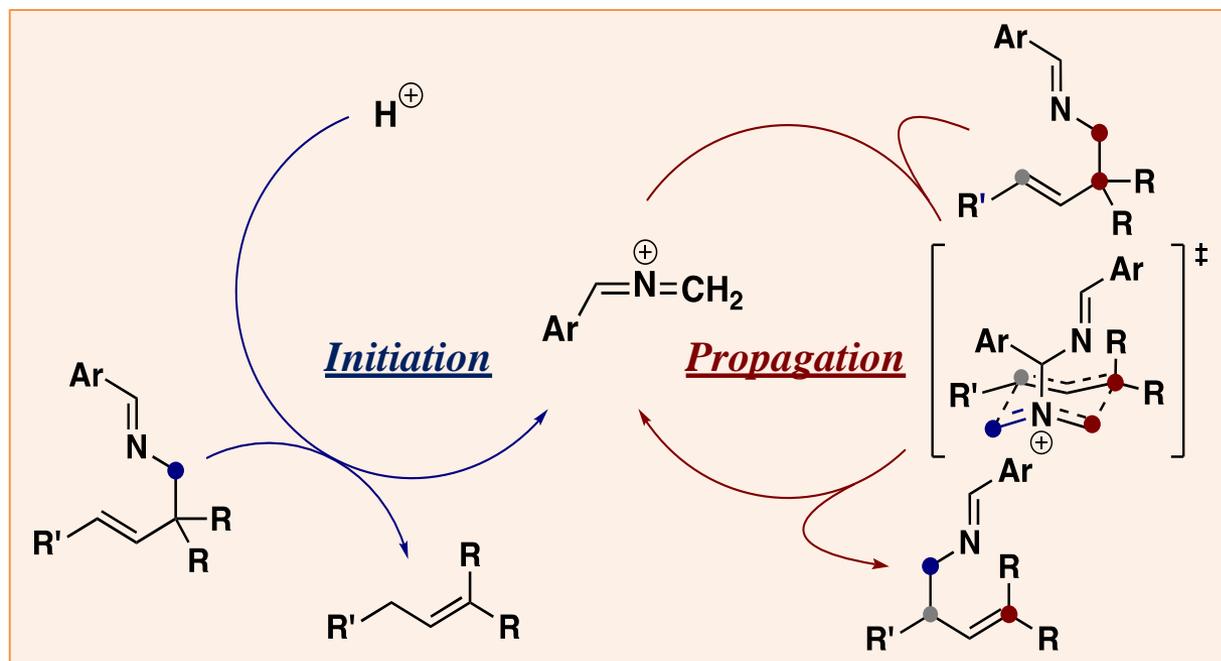
形式的分子内反応例(2)

分子研榎山先生・形式的転位反応

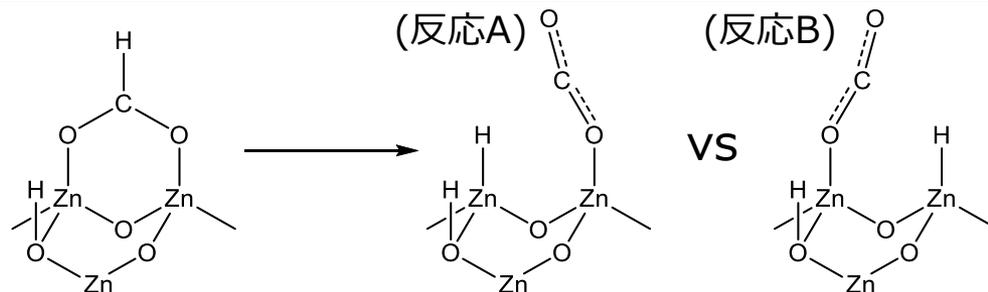
C. Jongwohan, Y. Honda, T. Suzuki, T. Fujinami, K. Adachi, N. Momiyama, *Org. Lett.* 21, 4991 (2019)

実験結果は、触媒となる
共通の第三者分子の存在
を示唆

↓
Ar-CH=N⁺=CH₂を介した
妥当な反応機構を提案

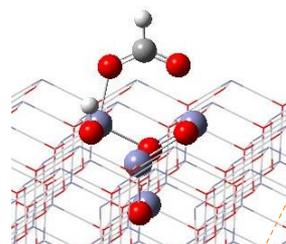


酸化亜鉛表面上のギ酸分解過程

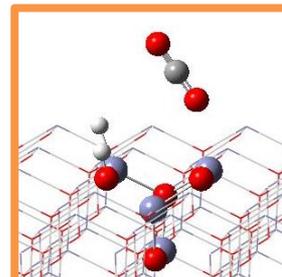
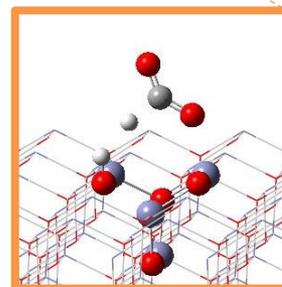
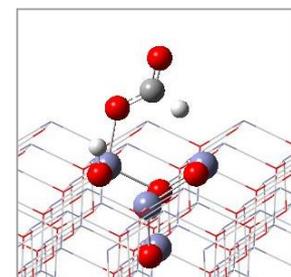
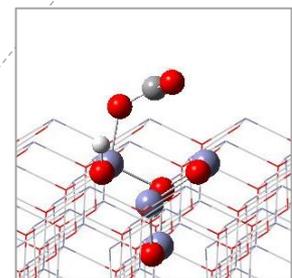
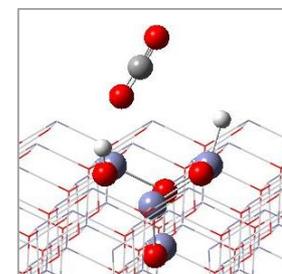
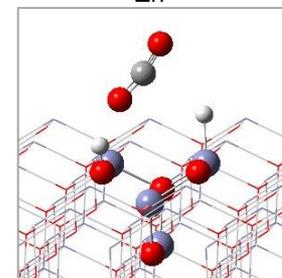
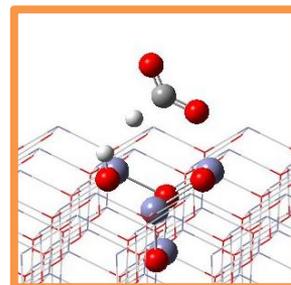
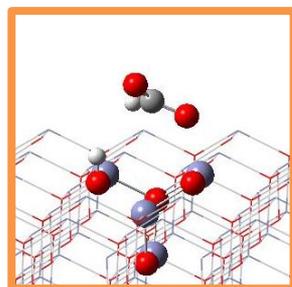


(Reaction A)

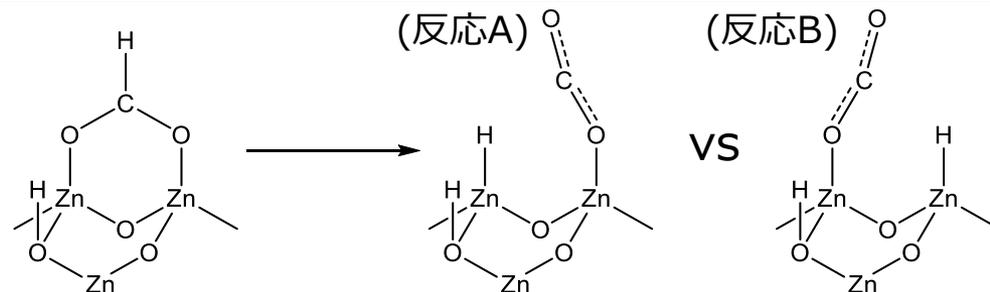
吸着水素が隣接する
ようにCO₂脱離が進行
する機構を支持



(Reaction B)



酸化亜鉛表面上のギ酸分解過程



ZnO表面上のギ酸分解反応障壁の計算値と実測値

計算値	実測値*	実測値**	先行研究の計算値***
43.2 kcal/mol	37.9 kcal/mol	35.8 kcal/mol	45.5 kcal/mol

*ZnO粉末での実験値 A. Ueno, T. Onishi, K. Tamaru, *Trans. Faraday Soc.* 67, 3585 (1971)

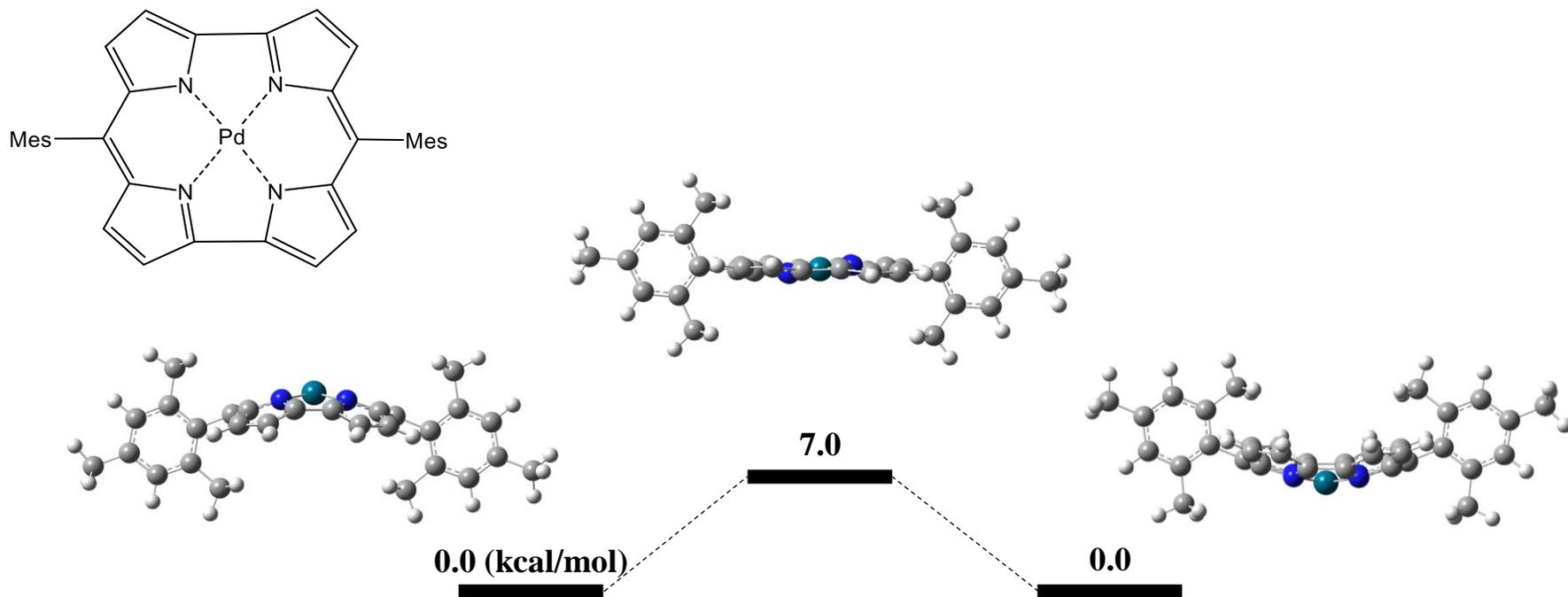
**Zn極性ZnO表面での実験値 J. M. Vohs, M. A. Barteau, *Surf. Sci.* 176, 91 (1986)

***MP2/LanL2DZ計算 M. Yoshimoto, S. Takagi, Y. Umemura, M. Hada, H. Nakatsuji, *J. Catal.* 173, 53 (1998)

活性化エネルギーの実測値をほぼ再現

その他の反応例(1)

名大忍久保先生・Pdノルコロール反転

T. Yonezawa, S. A. Shafie, S. Hiroto, H. Shinokubo, *Angew. Chem. Int. Ed.* 56, 11822 (2017)

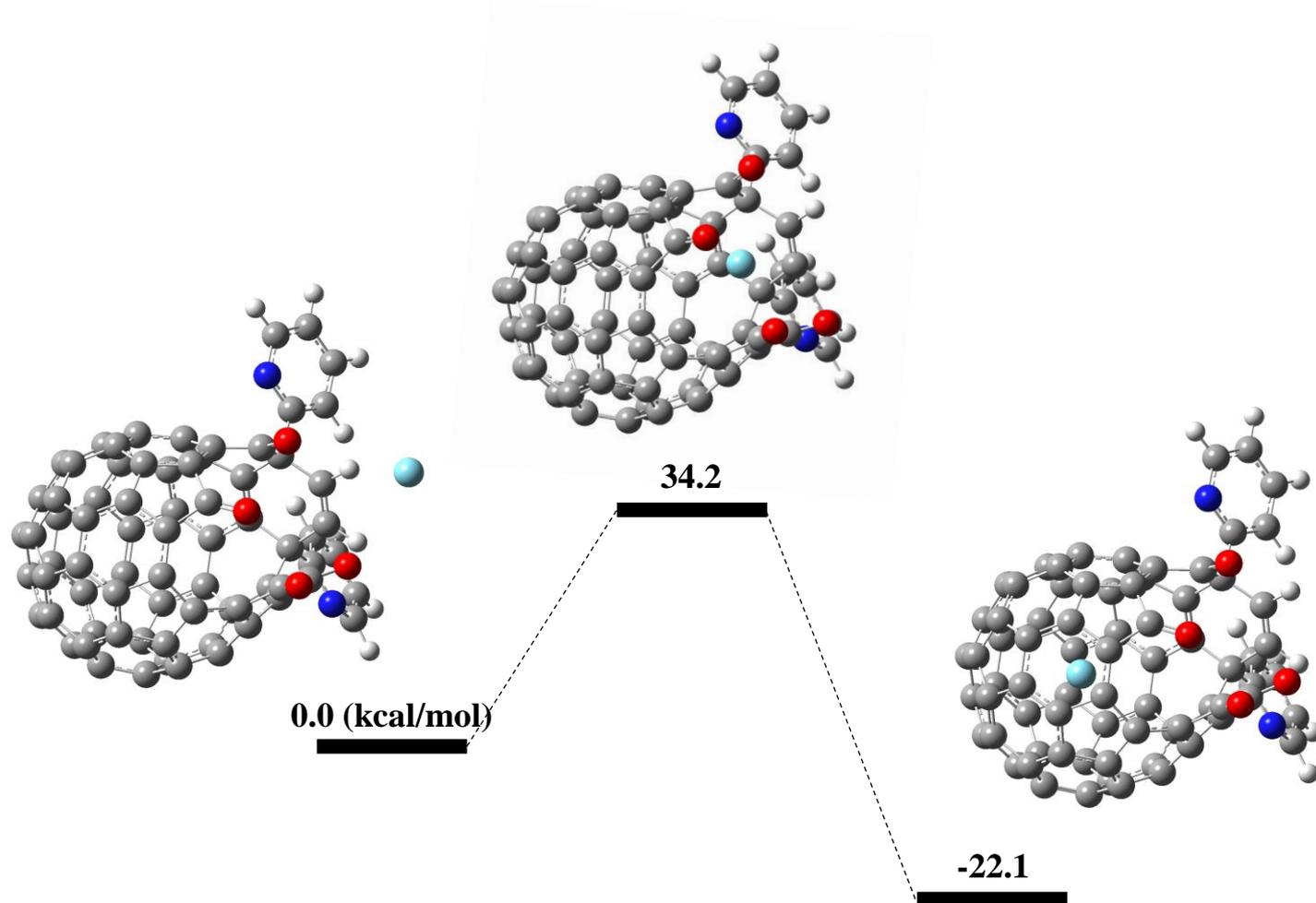
ノルコロール環反転障壁の計算値と実測値

計算値	実測値
7.0 kcal/mol	9.2 kcal/mol

ノルコロール環（ポルフィリン類似環）の反転障壁の実測値をほぼ再現

その他の反応例(2)

京大村田先生・フラーレンのAr内包過程

R. Zhang, T. Futagoishi, M. Murata, A. Wakamiya, Y. Murata, *J. Am. Chem. Soc.* 136, 8193 (2014)

Ar内包過程の妥当なTS構造と反応障壁を算出

Reaction plusを用いた研究論文

(2019年7月現在)

"Cation-Stitching Cascade": exquisite control of terpene cyclization in cyclooctatin biosynthesis

H. Sato, K. Teramoto, Y. Masumoto, N. Tezuka, K. Sakai, S. Ueda, Y. Totsuka, T. Shinada, M. Nishiyama, C. Wang, T. Kuzuyama, M. Uchiyama, *Sci. Rep.*, 2015, 5, 18471 / <https://www.youtube.com/watch?v=ugoGN1zLrM>

DFT Studies on the Mechanism of the Iridium-Catalyzed Formal [4 + 1] Cycloaddition of Biphenylene with Alkenes

H. Takano, N. Sugimura, K. S. Kanyiva, T. Shibata, *ACS Omega*, 2017, 2, 5228

Acid-Mediated Migration of Bromide in an Antiaromatic Porphyrinoid: Preparation of Two Regioisomeric Ni(II) Bromonorcorroles

H. Kawashima, S. Hiroto, H. Shinokubo, *J. Org. Chem.*, 2017, 82, 10425

Shaping Antiaromatic pi-Systems by Metalation: Synthesis of a Bowl-Shaped Antiaromatic Palladium Norcorrole

T. Yonezawa, S. A. Shafie, S. Hiroto, H. Shinokubo, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2017, 56, 11822

Nudged elastic band method and density functional theory calculation for finding a local minimum energy pathway of p-benzoquinone and phenol fragmentation in mass spectrometry

N. Sugimura, Y. Igarashi, R. Aoyama, T. Shibue, *Eur. J. Mass Spectrom.*, 2017, 23, 40

Energy-decomposition analysis of ion-neutral complexes along reaction coordinates of unimolecular proton-transfer reaction in gas phase: Comparison between 2-butanol radical ion and protonated 2-ethoxypropane ion

N. Sugimura, Y. Igarashi, R. Aoyama, T. Shibue, *Chem. Phys. Lett.*, 2017, 686, 124

Theoretical study of charge-remote fragmentation along the reaction coordinate of 1,4-hydrogen elimination in the gas-phase: Energy barrier and mechanism

N. Sugimura, Y. Igarashi, R. Aoyama, T. Shibue, *Chem. Phys. Lett.*, 2018, 691, 336

Computational Studies on Biosynthetic Carbocation Rearrangements leading to Quiannulatene: Initial Conformation Regulates Biosynthetic Route, Stereochemistry, and Type of Skeleton

H. Sato, T. Mitsuhashi, M. Yamazaki, I. Abe, M. Uchiyama, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2018, 130, 14968

Theoretical Study of Sesterfisherol Biosynthesis: Computational Prediction of Key Amino Acid Residue in Terpene Synthase.

H. Sato, K. Narita, A. Minami, M. Yamazaki, C. Wang, H. Suemune, S. Nagano, T. Tomita, H. Oikawa, M. Uchiyama, *Sci. Rep.*, 2018, 8, 2473

Theoretical Molecular Design of Hexasilabenzene Analogues Aiming for the Thermodynamic and Kinetic Stabilization

T. Nakamura, T. Kudo, *Comput. Theor. Chem.*, 2018, 1123, 61

Synthesis and Structure of a Stable Bis(methylene)-lambda4-sulfane

K. Sugamata, D. Hashizume, Y. Suzuki, T. Sasamori, S. Ishii, *Chem. Eur. J.*, 2018, 24, 6922

Construction of a pentacyclic ring system of isoryanodane diterpenoids by SmI2-mediated transannular cyclization

M. Koshimizu, M. Nagatomo, M. Inoue, *Tetrahedron*, 2018, 74, 3384

Reaction plusを用いた研究論文

(2019年7月現在)

Convergent Total Synthesis of Asimicin via Decarbonylative Radical Dimerization

T. Kawamata, A. Yamaguchi, M. Nagatomo, M. Inoue, *Chem. Eur. J.*, 2018, 24, 18907

Convergent Synthesis of Taxol Skeleton via Decarbonylative Radical Coupling Reaction

H. Matoba, T. Watanabe, M. Nagatomo, M. Inoue, *Org. Lett.*, 2018, 20, 7554

Physicochemical Prediction of Metabolite Fragmentation in Tandem Mass Spectrometry

W. Tanaka, M. Arita, *Mass Spectrom. (Tokyo)*, 2018, 7, A0066

1,2-Diazacyclopentane-3,5-diyl Diradicals: Electronic Structure and Reactivity

S. Yoshidomi, M. Abe, *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, 141, 3920

Ni(II) 10-Phosphacorrole: A Porphyrin Analogue Containing Phosphorus at the Meso Position

H. Omori, S. Hiroto, Y. Takeda, H. Fliegl, S. Minakata, H. Shinokubo, *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, 141, 4800

Iron-Catalyzed Cross Coupling of Aryl Chlorides with Alkyl Grignard Reagents: Synthetic Scope and Fe(II)/Fe(IV) Mechanism Supported by X-ray Absorption Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations

R. Agata, H. Takaya, H. Matsuda, N. Nakatani, K. Takeuchi, T. Iwamoto, T. Hatakeyama, M. Nakamura, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 2019, 92, 381

Highly Planar and Completely Insulated Oligothiophenes: Effects of pi-Conjugation on Hopping Charge Transport

Y. Ie, Y. Okamoto, T. Inoue, S. Tone, T. Seo, Y. Honda, S. Tanaka, S. K. Lee, T. Ohto, R. Yamada, H. Tada, Y. Aso, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2019, 10, 3197

Brønsted Acid-Initiated Formal [1,3]-Rearrangement Dictated by beta-Substituted Ene-Aldimines

C. Jongwohan, Y. Honda, T. Suzuki, T. Fujinami, K. Adachi, N. Momiyama, *Org. Lett.*, 2019, 21, 4991

価格・仕様

製品名	外部計算エンジン	販売価格	製品の特徴
Reaction plus Pro ver. 2.0	Gaussian (別売)	新規 AC 80万円 CM 200万円 UG AC 30万円 CM 50万円	<ul style="list-style-type: none"> • DFT等の量子化学手法を用いて本格的に反応経路が得られる • Gaussianのほとんどの計算方法に対応
Reaction plus Express ver. 2.0	不要	新規 AC 30万円 CM 60万円 (UG 無償)	<ul style="list-style-type: none"> • 計算手法はPM6法(固定) • 非常に速く反応経路を得られる • このソフト単体で運用可能

- 対応OS : RHEL/CentOS 6以降・Windows 7以降・macOS High Sierra以降 (いずれも64bit OSのみ)
- 両ソフトとも、1ヶ月間全ての機能が利用可能な無償評価版あり
- ProとExpress両方ご購入の場合は12万円割引 (ACのみ)

(参考)関連ソフトとの特徴比較

➤ Gaussian 16

- 量子化学計算の汎用ソフト。反応経路計算以外に様々な物性計算ができる。
- TSが正確に求まるが、Gaussianだけで求めるには熟練的技術が必要とされる。

➤ GRRM-Neo11

- 正確なTSが網羅的に求まる。
- 想定外の反応経路やTS構造を得ることが可能。
- 終状態構造を想定せずに、始状態構造のみから反応経路計算を行うことが可能。

➤ Reaction plus Pro 2

- 始状態と終状態の構造から、それらを結ぶ反応経路やTS候補構造が求まる。
- 求めたTS候補構造からGaussian計算を行うことにより、正確なTS構造が求まる。
- Gaussianとほとんど同じ操作方法で運用できる。

➤ Reaction plus Express 2

- 概要はReaction plus Pro 2と同じ。
- 反応経路やTS候補構造が極めて短時間（～数分程度）で求まる。
- 反応系によっては反応経路が上手く求まらないことがある。

お問い合わせ

➤ **お電話**

03-5446-5531 (東京本社)

075-353-0120 (西日本営業所)

➤ **メールアドレス**

hpc_sales@hpc.co.jp

➤ **WebPage**

<https://www.hpc.co.jp/chem/software/react2/>