

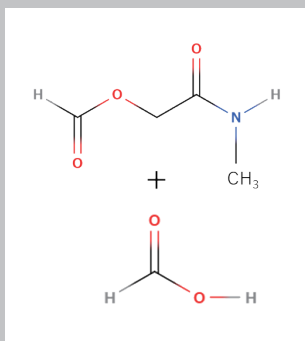
# GRRM23

化学反応シミュレーションソフトウェア



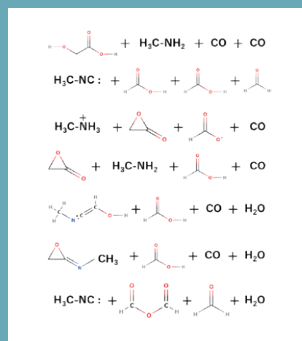
化合物の合成経路や、分解生成物とその経路を探索できます  
化審法、EINECS、TSCA登録に便利！

生成物の構造を入力する



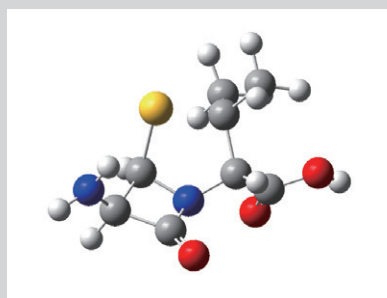
GRRM23  
量子化学的逆合成解析

反応物の候補群が得られる



例) 6-アミノペニシラン酸 (6-APA)

反応障壁



52.574 kcal/mol	54.555 kcal/mol	64.003 kcal/mol	68.602 kcal/mol
72.565 kcal/mol	80.545 kcal/mol	89.974 kcal/mol	114.316 kcal/mol

製品名	GRRM23
機能	反応経路自動探索(ADDF)、振動解析(FREQ)、零点振動エネルギー補正、熱力学関数計算、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)、構造自動最適化(ReStruct)、エネルギー自動再計算(ReEnergy)、初期構造自動発生、座標指定・パート(原子団)指定、制限探索(EQOnly)、Large ADD Following(LADD)、励起状態解析、反応経路自動探索(AFIR)、AFIR経路の改良(LUP)、周期境界条件探索(結晶・表面)、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、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
動作環境	<p>-ハードウェア-</p> <p>下記が動作する x86_64 計算機</p> <p>-OS-</p> <p>Red Hat Enterprise Linux 7.x または CentOS 7.x Red Hat Enterprise Linux 8.x または CentOS 8.x または AlmaLinux 8.x (Red Hat Enterprise Linux 6.x および CentOS 6.x は非対応)</p> <p>-必須ソフトウェア-</p> <p>Gaussian16 または Gaussian09 ※1</p> <p>-オプションソフトウェア-</p> <p>Gaussian03、Molpro、GAMESS、ORCA、Turbomole、SIESTA ※2※3</p>
価格	お問い合わせください

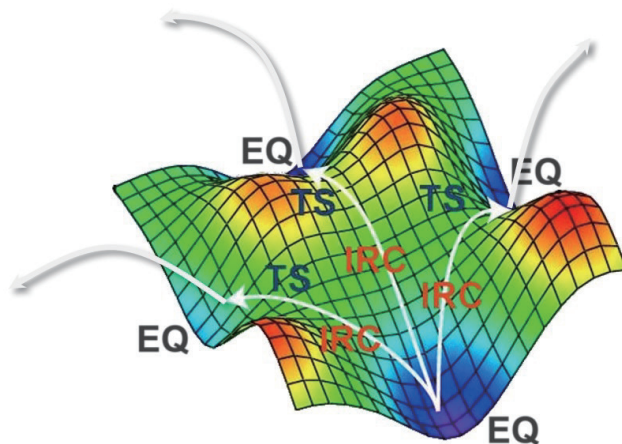
※1 本製品に含まれておりませんので予め御用意ください。

※2 本製品に含まれておりませんのでお使いになりたい場合には予め御用意ください。

※3 これら以外のab-initio programについても組み込み可能とする汎用インターフェースがGRRM23には搭載されています。

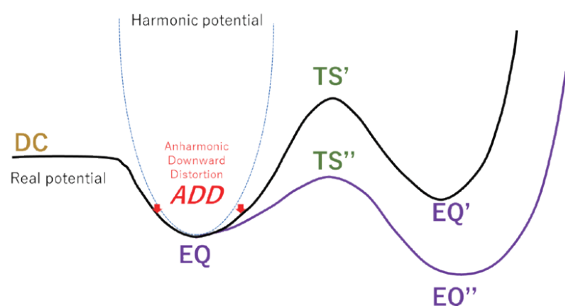
## 応用実績

- 有機反応
- 有機金属触媒反応
- 微粒子触媒
- ラジカル反応
- 電子励起状態を含む光反応
- 結晶相転移
- 酵素触媒反応



### キーアルゴリズム①

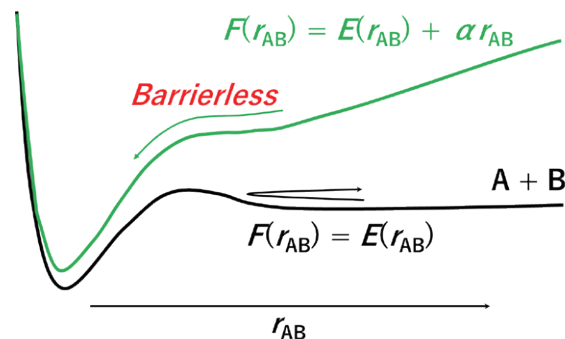
## ADDF



安定構造からポテンシャル面を登って  
反応経路を探索する

### キーアルゴリズム②

## AFIR



原子間に人工力を掛けて反応を誘起させて  
反応経路を探索する