

GRRM14

2011 年に GRRM11 をリリースしてから 3 年目を迎え、2014 年には、GRRM14 のリリースが予定されています。

GRRM14 に搭載される新機能

- **人工力誘起反応法 (AFIR 法)**

2 分子・多成分反応経路の自動探索や分子内環化・転移反応の高速探索が可能になり、有機化学・物質化学への適用性が飛躍的に向上します。

- **反応経路の自動再最適化**

Locally Updated Plane 法の導入による近似的反応経路の最適化を行うことで TS 探索の完全性が向上します。

- **Transition Vector を用いる周期境界条件の利用**

結晶構造自動探索への適用が可能になります。

- **Gamess への自動対応**

Gaussian、Molpro の他に、Gamess が使えるようになります。

- **ポテンシャル計算外部プログラム用インターフェイス**

任意のポテンシャルエネルギー計算と GRRM14 とを接続するユーザープログラム用の一般的なインターフェイスが追加されます。