

## GRRM プログラム 機能比較表

機能 (Job-type / Option)	GRRM1.22	GRRM11	GRRM14	GRRM17	GRRM-Basic
反応経路自動探索 (ADDF) <sup>a</sup>	○	○	○	○	○
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 <sup>b</sup>	○	○	○	○	○
座標指定 パート(原子団)指定	○	○	○	○	○
部分構造固定 <sup>c</sup>	○	○	○	○	○
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 経路の改良 LUP	×	×	○	○	×
RePath	×	×	○	○	×
結晶構造探索 (周期構造探索)	×	×	×	×	×
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)	×	×	×	○	×
外部プログラムインターフェース	増設可能	増設不可	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
		MOLPRO	MOLPRO	MOLPRO	
			GAMESS	GAMESS	
				TURBOMOL	
				SIESTA	

a ADD-Following(ADDF)による自動探索の Job-type 名は、GRRM17 以外では GRRM、GRRM17 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)