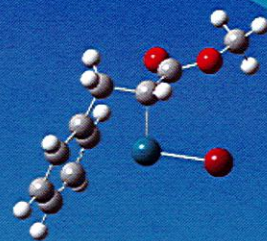


# Reaction plus Pro 2-A Express 2-A

For Linux / Windows

簡単・手軽に反応メカニズムがわかる!!



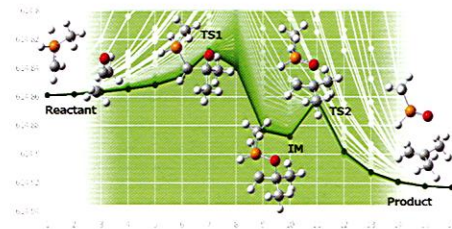
Reaction plus Pro は「研究者のセンス」と「シミュレーション技術」をうまく活用したソフトウェアです。

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。

様々な量子化学計算条件 (DFT 汎関数・基底関数・溶媒効果など) にも対応。経由する中間構造を複数指定することで、複雑な反応も手軽に扱えます (Reaction plus Pro 2-A)

## 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。



有機化学  
反応に!

固体表面上の  
反応に!

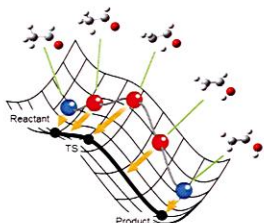
生体分子の  
反応に!

光化学  
反応に!

## Reaction plus Pro2-A の特徴

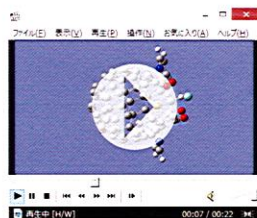
### 反応経路や遷移状態が 簡単・手軽に見つかる

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 Pro 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。



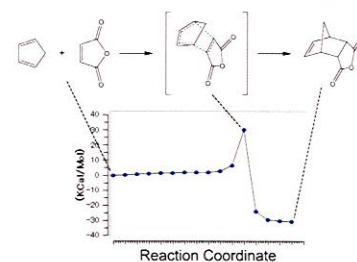
### 反応の様子が動画で わかる

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。

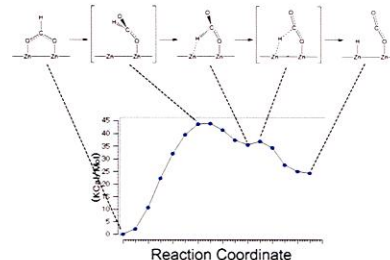


## Reaction plus Pro2-A の計算例

### Diels-Alder 反応



### ZnO 表面上のギ酸分解過程



※ ZnO の反応は Reaction plus Pro2 のみ可能

### 計算エンジンに Gaussian を 採用することにより高速化を実現

計算エンジンに Gaussian を採用することで、高速かつ高精度の反応経路計算を可能にしました。また、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、ONIMO 計算等も利用可能です。





## 仕様・価格

### Reaction plus Pro 2-A / Express 2-A

計算エンジンに Gaussian (Pro) または高速 PM6 法 (Express) を採用することにより高速化を実現。

Pro では、計算エンジンに Gaussian を採用することで、高速かつ高精度の反応経路計算を可能にしました。また 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、ONIMO 計算等も利用可能です。

Express では、PM6 法を高速化することにより、わずか数十秒～数分程度で反応経路を求められます。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。

Reaction plus Pro 2-A	Reaction plus Express 2-A
新規ライセンス価格 (税抜)	
200万円 (アカデミック：80万円)	60万円 (アカデミック：30万円 ※1)
Ver.1からのアップグレード ※2	
50万円 (アカデミック：30万円)	無償

製品名	Reaction plus Pro 2-A (2018年6月1日 発売)	Reaction plus Express 2-A (2018年6月1日 発売)
インプット作成方法 ※1 ※2	GaussView テキスト編集 ONIOM計算支援ツール	GaussView テキスト編集
中間構造の指定	何個でも指定可能	何個でも指定可能
初期構造読み込み対応ファイル形式	xyz pdb mol2	xyz pdb mol2
初期ビーズ構造の自動調整	○	○
座標軸の自動修正	○	○
量子化学計算	○	×
PM6計算	○	○ (高速)
開殻系の計算	○	○
ONIOM計算	○	×
一部の原子座標を固定	○	○
chkファイルから 初期軌道の読み込み	○	×
アニメーション出力ファイル形式 ※3	Gaussian log xyz pdb	Gaussian log xyz pdb
別途必要ソフトウェア	Gaussian 16/09	なし

## サポートオプション

Reaction plus 使い方サポート	メールサポート	出張サポート
サポート内容	質問メール対応(ひと月あたり4回) 使い方セミナー受講(初回のみ) ※1	対面での質問対応 ※1
価格	80万円/年	25万円/日 (10時～18時)

※1 ノード間並列には対応していません。※2 GaussView 5.0.9 for Windows, VMD 1.9.1 にて動作確認を行っています。

※3 すべての環境について動作 を保証するものではありません。動作報告環境については Web をご覧ください。

※4 遠隔地での実施の場合は別途費用が発生することがあります。

## 機能比較

製品名	Reaction plus Pro 2-A	Reaction plus Express 2-A
計算速度 (計算時間の目安 ※1)	★★★ (数時間～数日)	★★★★★ (数分程度)
計算精度	★★★★★	★★
ONIOM 計算 (酵素反応などに)	○	×
原子座標の固定 (不均一触媒などに)	○	○
Gaussian Chk ファイルの読み込み (ラジカル反応などに)	○	×
量子化学計算手法	Gaussian の Opt 機能に対応する すべての計算手法	PM6
基底関数	Gaussian で利用可能な すべての基底関数	-

※1 計算時間は反応系のサイズや種類、計算機性能によって異なります。Intel Xeon E5-2690 2.90GHz x2(16 コア) 搭載の計算機を用いて、数十原子からなる反応系を計算したときのおおよその時間です。



<https://axel.as-1.co.jp/>  
AXEL@so.as-1.co.jp



Copyright© 2020 HPC SYSTEMS Inc., All Rights Reserved.