

反応経路・遷移状態 計算ソフトウェア

# Reaction plus Pro 2

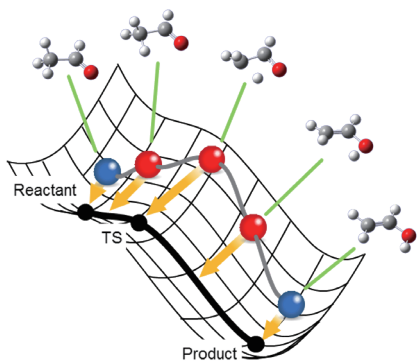
Reaction plus Express 2

簡単・手軽に反応メカニズムがわかる!!



基底状態の反応はもちろん、励起状態にも適応可能です

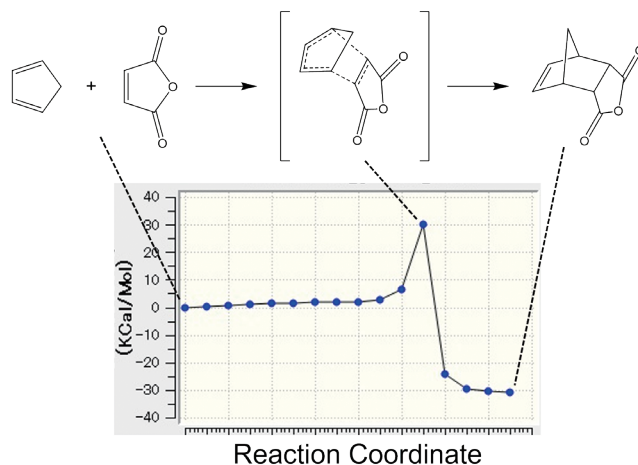
## Reaction plus Pro2 の特徴



- 反応経路や遷移状態が簡単・手軽に見つかる
- 反応の様子が動画でわかる
- 計算エンジンにGaussianを採用することにより高速化を実現

## Reaction plus Pro2 の計算例

### Diels-Alder反応



## 有機化学のための量子化学計算入門 Gaussianの基本と有効利用のヒント

東京都立大学准教授 博士(工学) 西長 亨

HPCシステムズ株式会社 計算化学シニアエキスパート 博士(工学) 本田 康  
(共著)

1. 量子化学計算で何ができるか?
2. 計算実行のための環境づくり
3. 計算手法と基底関数
4. Gaussianの基本的な使い方
5. 構造最適化
6. 分子軌道
7. 基底状態の物性
8. 化学反応メカニズム
9. 開殻系の取り扱い
10. 励起状態の物性
11. 計算を有効活用するためのヒント



株式会社装華房 / B 5判 / 224頁 / 2色刷 / 2022年6月発行 / ISBN 978-4-7853-3523-6 C3043

定価 3,850 円 (本体 3,500 円 + 税 10 %、送料込み)

## インターンシップ

HPCシステムズでは、インターンの受け入れを実施しています。  
詳しくは、QRコードか、もしくはメールアドレスからお問い合わせください。

採用担当まで  
hpcs\_hr@hpc.co.jp



HPCシステムズ株式会社  
本社(東京) : ☎ 03-5446-5531  
西日本営業所(京都) : ☎ 075-353-0120

www.hpc.co.jp  
hpcs\_sales@hpc.co.jp