

基底状態 だけでなく、

HPC SYSTEMS

励起状態の反応経路も 計算可能！

反応経路・遷移状態 計算ソフトウェア

Reaction plus Pro2

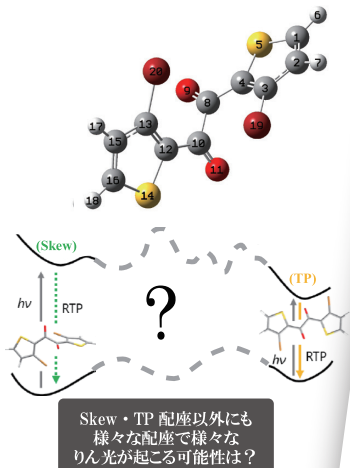
For Linux / Windows

化学反応の計算をもっと簡単・手軽に！

計算例 高効率りん光を示すチエニルジケトンの構造緩和・回転障壁

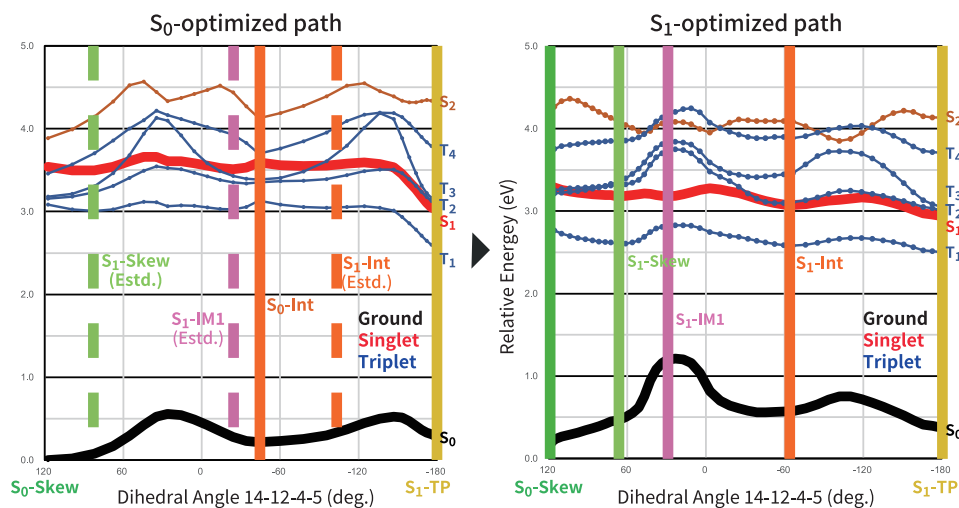
計算動機

対象分子の励起状態ポテンシャルのどこで
項間交差や内部転換が起きるか等を知りたい



計算結果

S₁ 反応経路上の S_n・T_n ポテンシャル曲線は、S₀ 反応経路上のポテンシャル曲線と全く違う！
→ 励起状態の反応経路計算の必要性を示唆



HPC SYSTEMS

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

※ 会社名及び製品名は、当社及び各社の商標または登録商標です。※ 価格、写真、仕様等は予告なく変更する場合があります。※ 製品の色調は実際と異なる場合があります。※ 2024年7月現在の内容です。