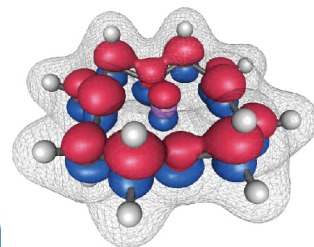


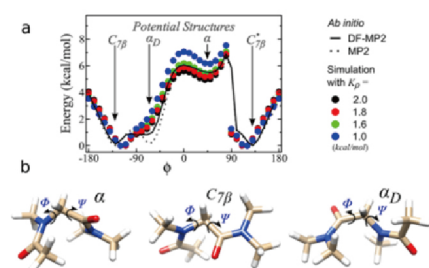
精确、快速的从头算量子化学综合软件



- ◆ 最早由诺贝尔化学奖获得者John.A.Pople主导开发
- ◆ 电子结构从头计算程序
- ◆ 可以对分子的基态和激发态进行第一定律计算
- ◆ 广泛应用于理论化学、材料科学、生物化学等相关领域的研究
- ◆ 具有便捷的可视化图形设置界面-Iqmol

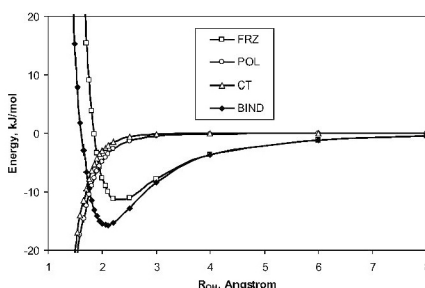
Q-Chem应用领域

势能面扫描



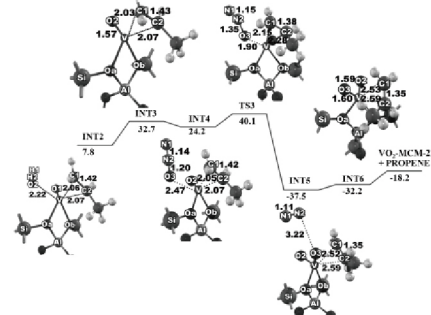
Development and use of an atomistic CHARMM based forcefield for peptoid simulation. J. Comput. Chem. (2013), 35, 360.

分子间的相互作用



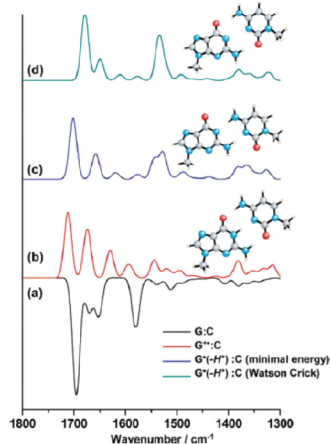
Unravelling the Origin of Intermolecular Interactions Using Absolutely Localized Molecular Orbitals. J. Phys. Chem. A. (2007), 111, 8753.

过渡态搜索和反应路径分析



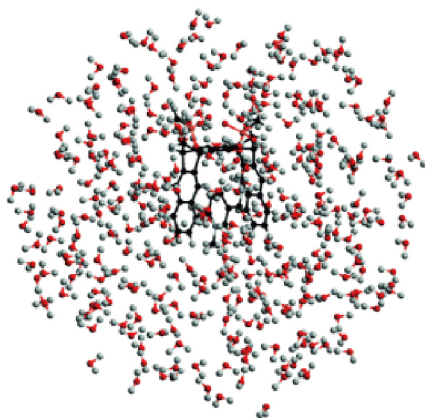
Oxidative Dehydrogenation of Propane over a VO₂-Exchanged MCM-22 Zeolite: A DFT Study. ChemPhysChem (2010), 11, 3432

激发态和光谱计算



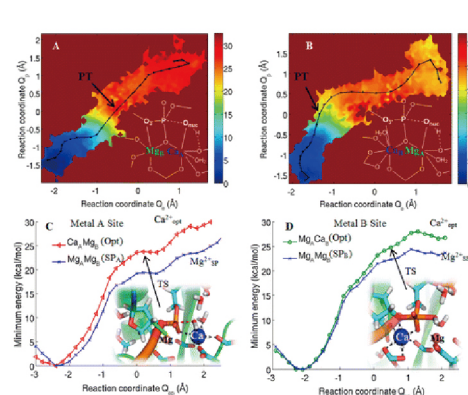
Infrared Characterization of the Guanine Radical Cation: Finger Printing DNA Damage. J. Phys. Chem. B. (2010), 114, 3660.

线性标度的量化计算



Ab Initio NMR Spectra for Molecular Systems with a Thousand and More Atoms: A Linear-Scaling Method. Angew. Int. (2004), 43, 4485.

QM/MM计算



Calcium Inhibition of Ribonuclease H1 Two-Metal Ion Catalysis. J. Am. Chem. Soc. ASAP.

Q-Chem 4.3 新功能特点

- ◆ 能够在CIS、自旋翻转 CIS、TDDFT及自旋翻转TDDFT水平上求得电子态之间耦合（如非绝热耦合）的解析导数；
- ◆ 在XSAPT中可以使用第三代的色散势能（+D3）；
- ◆ 可以使用非平衡态的溶剂化模型（PCM）计算溶液中的垂直电子激发能和离子化能；
- ◆ 在CC和EOM-CC的波函数求解中实现了电子态间自旋轨道耦合的计算；
- ◆ 当使用PARI-K方法计算交换能时，可以极大地提高在TZ及更大基组下的密度泛函计算速度；
- ◆ 可以对双光子吸收的过渡态和横截面计算使用EOM-CC波函数；
- ◆ ADC和CC/EOM-CC方法具有新的激发态分析方法；
- ◆ EOM-IP-CCSD和EOM-EA-CCSD可以使用新的Dyson轨道代码；
- ◆ 具有热辅助占据密度泛函理论（TAO-DFT）方法；
- ◆ 具有MP2[v]方法，它是使用双基组方法来近似MP2的能量；
- ◆ 在半局部交换相关泛函中使用LFAs渐近校正方案；
- ◆ 在TDDFT的能量及导数求解中使用共享内存的并行算法；
- ◆ 具有色散修正项的杂化泛函方法wM05-D, wM06-D3, and wB97X-D3；
- ◆ 具有无参双杂化泛函PBE0-2 和 PBE0-DH；
- ◆ 为能带间隙修正计算提供间断恢复方案。



源资信息科技(上海)有限公司

电话: +86-21-32504385

网址: www.tri-ibiotech.com

邮箱: support@tri-ibiotech.com

上海总公司

地址: 上海市长宁区天山路18号701室

重庆办事处

地址: 重庆市渝中区石油路大坪时代天街

B馆3栋2803

北京分公司

地址: 北京市顺义区安泰大街融慧园15-3

南京维保中心

地址: 南京市玄武区珠江路699号

东鼎大厦C座401

