

密度泛函理论 (DFT)

自带 200 多种泛函。Q-Chem 的最新算法计算速度高速且精确。

溶剂化作用、量子力学/分子力学、和嵌入方法

Q-Chem 支持的隐式溶剂模型包括 SMD、C-PCM、COSMO 和显式溶剂模型包括密度嵌入方法 (density embedding methods)、通过 QM/MM 接口与 Amber、CHARMM、GROMACS 软件交互。

激发态 (Excited States) 及性质

支持最先进的模拟激发态的方法包括 CIS、TDDFT、EOM-CC 和 ADC。

Post-HF 方法

Q-Chem 拥有最前沿的描述电子相关的方法包括 Coupled-Cluster、ADC、CASSCF、selected CI、RAS-CI、spin flip 和 variational 2-RDM。

光谱模拟

Q-Chem 提供能模拟气相和凝聚相的 IR、UV-Vis、vibronic、photoelectron、VCD、NMR 以及其它非线性光谱。此外还有大量用于模拟 X 光谱的工具包括 XPS、XAS、XES、俄歇电子能谱 (Auger)、X 光电子圆二色光谱 (XECD) 等等。

云计算

Q-Chem 提供方便快捷的基于 Amazon EC2 平台的云计算。

教学



Q-Chem 提供免费的教学资源包括量化计算实验、教学视频、网络研讨会视频、讲习班视频以及各个客座教授讲座视频。

<https://www.q-chem.com/learn/>

网络研讨会系列



一起来欣赏一系列 Q-Chem 专家资深开发者的网络研讨会视频吧！

<https://www.q-chem.com/webinars/>

Q-Chem Talk 网络论坛



来这里讨论、求助以及浏览以往的问答记录。

<https://talk.q-chem.com/>

Q-Chem 用户手册



来这里阅读学习 Q-Chem 的更多功能及其所基于的方法理论。

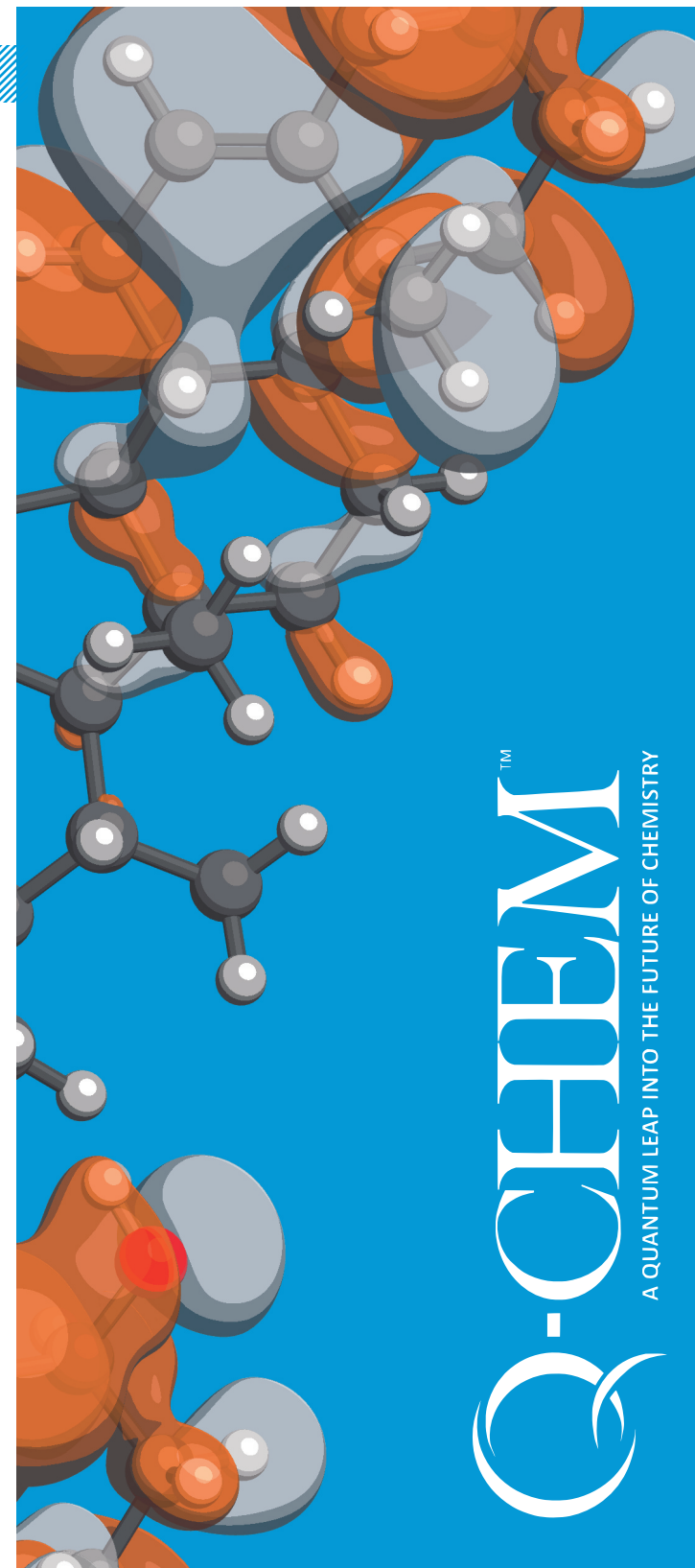
<https://manual.q-chem.com/>

联系我们

① info@q-chem.com
📞 sales@q-chem.com
✂️ support@q-chem.com

🏢 6601 Owens Drive, Ste 240
Pleasanton, CA 94588

🌐 <https://www.q-chem.com>



Q-Chem 开放式的开发协作

自从 1993 年以来, Q-Chem 为全世界的科学家提供了可以快速精确处理计算化学问题的高质量的量子化学程序。

我们开放式的开发协作模式允许全球科学家作为开发者利用 Q-Chem 已有的严格测试过的程序为基础, 开发他们的方法程序, 进而添加到 Q-Chem 里。与此同时, Q-Chem 用户可以得到最前沿的最权威的方法和专业的客户支持。

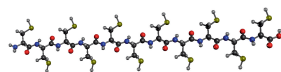
自洽场运算的黑盒流程 (Robust SCF)

Q-Chem 的最新黑盒多步自洽场运算流程提供了更精确稳定的自洽场收敛, 包括自动发现和矫正早期自洽场迭代发散和当迭代不收敛时自动切换迭代算法等。这套流程对大数据运算和难收敛体系很有帮助。

优化改进了的 DFT 运算

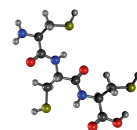
Q-Chem 6.3 提升了对中大体系的基于密度拟合方法的 DFT 能量及其梯度的运算速度。测试结果证明比 Q-Chem 6.2 提升了 20~30%。

DFT w/ Density Fitting:
~20% Speedup



Cysteine-11
20.9% speedup
B3LYP/def2-TZVP(2485)/
rijk-def2-TZVP(6680)

Pure DFT Frequency:
~20-30% Speedup



Cysteine-3
34.8% speedup
B97-D3/def2-SVP(363)

Benchmark results showing speedup relative to Q-Chem 6.2. Calculations were run using Q-Chem 6.3 on AMD EPYC (Milan) 7713P processors on 32 cores.

耦合簇方法 (Coupled-Cluster) 和方程运动耦合簇 (EOM-CC)

新的用于研究开壳层体系的方法包括 complex-valued RI-EOM-CCSD, EOM-DEA/DIP 的 spin-orbit coupling 和解析梯度。新的精度更高的多体方法 (many-body methods) 包括应用到 CC2 的 Brillouin-Wigner 分割法、EOM-CCSDT 方法系列: EE、SF、IP、EA、DIP、DEA。

用于模拟环境效应的新工具

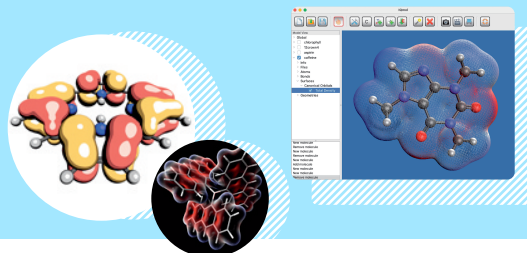
异相 PCM, 可以研究含有不同介电常数区域的分子体系, 用于模拟各向异性的溶剂化效应。密度矩阵一般多体展开 (GMBE-DM) 方法, 可以减少对于适用的大基组体系的 SCF 计算减少一个数量级的运算时间。SMD 的振动分析, 利用半数值计算梯度方法可以运算较大体系的二阶梯度。

更多功能

- 新的分析工具: Broken Bond Orbital 方法和 TDDFT charge-transfer metrics
- 数值梯度和 MBE 支持 MPI 并行
- 分析模拟 Auger decay 光谱
- 更多的用于计算 NEO 的新方法以及改进方法
- 新的 PV 机械化学压力模拟方法 (mechanochemical pressure model)

IQmol

Q-Chem 配套的免费软件, 用于分子的构建和可视, 也可以用来构建 Q-Chem 输入文件, 提交作业到 Q-Chem 远程服务器运算短作业! <https://www.iqmol.org>



Q-Cloud

没有自己的运算服务器? Q-Cloud 助你在 AWS 云服务器上运算计算作业!



免费 DEMO 版

点击联系我们获取免费 DEMO license
<https://www.q-chem.com/try>



Try Q-Chem