

Smart Lab 材料開発向け 計算化学統合プラットフォーム

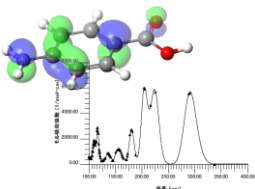
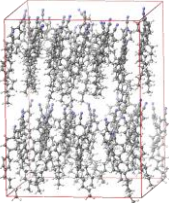
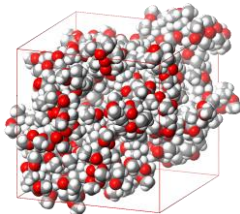
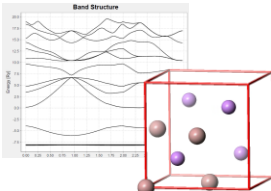
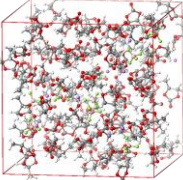
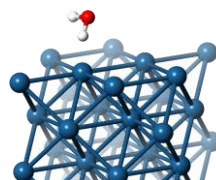
SCIGRESS

FUJITSU

分子力学法、分子動力学法、半経験的分子軌道法、非経験的分子軌道法、密度汎関数法、第一原理計算を直感的な操作でご利用いただけます。専門家による受託計算も行っており、お客様の新材料、新素材の研究開発を支援します。



主な計算対象

試薬色素  <ul style="list-style-type: none">● HOMO/LUMO計算● 紫外-可視スペクトル● 化学反応解析	液晶  <ul style="list-style-type: none">● 液晶セルビルダー● 分子配向● 相変化	ポリマー  <ul style="list-style-type: none">● ガラス転移点● 屈折率● 弾性率
半導体  <ul style="list-style-type: none">● バンド計算、状態密度計算● 欠陥● 結晶成長	電池  <ul style="list-style-type: none">● イオン伝導・拡散● 電解質の分子間相互作用● 電極反応	触媒  <ul style="list-style-type: none">● 界面反応機構● 表面吸着● 酸化還元

対応分子系	低分子、高分子、結晶、アモルファス、溶液、界面など
対応計算法	分子力学法、非経験的分子軌道法、半経験的分子軌道法 密度汎関数法、分子動力学法、第一原理計算、機械学習MD
対応アプリ	富士通ソフト MO-G, MO-S, MD-ME, Mechanics, ZINDO, DGauss 商用ソフト Gaussian, CONFLEX オープンソース GAMESS, LAMMPS, Quantum ESPRESSO, MOPAC, DeePMD-kit

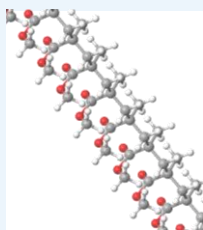
※対応アプリの製品名は、各社の商標または登録商標です。

材料開発向け計算化学統合プラットフォーム

主な機能

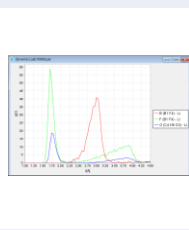
ビルダー

- ・各種ポリマー
- ・液晶
- ・ランダムセル
- ・結晶テンプレート



解析

- ・MD二次解析
- ・反応解析

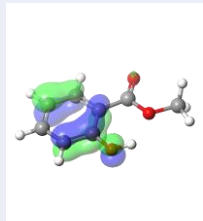


情報管理

- ・スプレッドシート
- ・プロパティシート
- ・分子ライブラリ

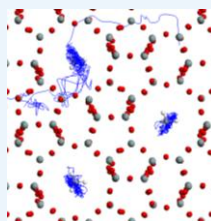
MO

- ・構造最適化
- ・分子軌道
- ・赤外スペクトル
- ・紫外可視スペクトル



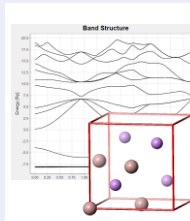
MD

- ・熱力学的諸量
- ・力学特性
- ・輸送係数



第一原理

- ・バンド図
- ・状態密度図
- ・電気特性
- ・光学特性



製品・ライセンス構成

基本パッケージ

- **Basic** 基本パッケージ 簡単なGUI操作および基本計算エンジンを収録

Mechanics	分子力学法プログラム
Extended Hückel	分子軌道法プログラム
ZINDO	紫外可視スペクトル計算プログラム
DGauss	密度汎関数法プログラム
Project Explorer	研究プロジェクトのファイル管理、 対象化合物の各種パラメータの参照・編集

Gaussian連携機能	Gaussian社製Gaussianの連携機能 Gaussianは別途購入が必要
GAMESS連携機能	アイオワ州立大学で開発されたGAMESSの連携機能 GAMESSは別途入手が必要

オプション

MO

● MO I/F

分子軌道法の計算に必要なツール
MOPAC連携機能

● MO エンジン

富士通製：MO-G, MO-S

MD

● MD I/F

分子動力学法の計算に必要なツール
LAMMPS連携機能

● MD エンジン

富士通製：MD-ME

第一原理

● 第一原理 I/F

Quantum ESPRESSO連携機能

QSPR

● QSPR

複数化合物に対するバッチ処理
複数のMD計算を同時・連続に計算、QSPR

フルモジュールパッケージ

- **Ultra V3** 基本パッケージと全オプションを含んだフルパッケージ

操作トレーニングWebセミナー 毎月開催

お申し込みはこちら

※富士通 イベント・セミナー ページに移動

1カ月 無償トライアル受付中

お申し込みは contact-sg@cs.jp.fujitsu.com へ

動作環境

● Windows版	OS : Windows 11 64bit CPU : Core i5 8000番以上推奨 メモリ : 8GB以上推奨
● Linux版 (計算エンジン専用)	OS : RedHat Enterprise Linux, AlmaLinux, Ubuntu CPU : Core i5 8000番以上推奨 メモリ : 8GB以上推奨

お問い合わせ先

富士通株式会社

クロスインダストリーソリューション事業本部 Healthy Living事業部 Life Scienceグループ contact-sg@cs.jp.fujitsu.com