

SCIGRESS (サイグレス)

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。



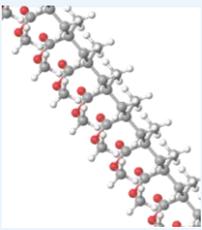
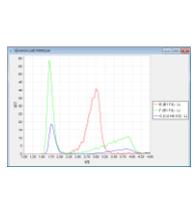
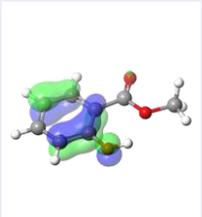
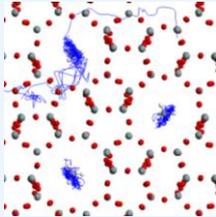
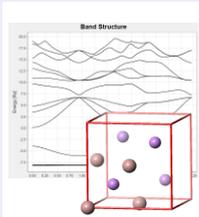
主な計算対象

<p>試薬色素</p> <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 	<p>液晶</p> <ul style="list-style-type: none"> ● 液晶セルビルダー ● 分子配向 ● 相変化 	<p>ポリマー</p> <ul style="list-style-type: none"> ● ガラス転移点 ● 屈折率 ● 弾性率
<p>半導体</p> <ul style="list-style-type: none"> ● バンド計算、状態密度計算 ● 欠陥 ● 結晶成長 	<p>電池</p> <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 	<p>触媒</p> <ul style="list-style-type: none"> ● 界面反応機構 ● 表面吸着 ● 酸化還元

<p>対応分子系</p>	<p>低分子、高分子、結晶、アモルファス、溶液、界面など</p>
<p>対応計算法</p>	<p>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</p>
<p>対応アプリ</p>	<p>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</p>

※対応アプリの製品名は、各社の商標または登録商標です。

主な機能

<h3>ビルダー</h3> <ul style="list-style-type: none"> 各種ポリマー 液晶 ランダムセル 結晶テンプレート 	<h3>解析</h3> <ul style="list-style-type: none"> MD二次解析 反応解析 	<h3>情報管理</h3> <ul style="list-style-type: none"> スプレッドシート プロパティシート 分子ライブラリ 
<h3>MO</h3> <ul style="list-style-type: none"> 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 	<h3>MD</h3> <ul style="list-style-type: none"> 熱力学的諸量 力学特性 輸送係数 	<h3>第一原理</h3> <ul style="list-style-type: none"> 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

● **SCIGRESS Basic V3** SCIGRESSの基本パッケージ 簡単なGUI操作および基本計算エンジンを収録

Mechanics Extended Hückel ZINDO DGauss Project Explorer	分子力学法プログラム 分子軌道法プログラム 紫外可視スペクトル計算プログラム 密度汎関数法プログラム 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 GAMESS連携機能	Gaussian社製Gaussianの連携機能 Gaussianは別途購入が必要 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

● **SCIGRESS Ultra V3** SCIGRESSの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

<h3>ライセンス</h3> <ul style="list-style-type: none"> ● スタンドアロン 特定のPCのみで利用する場合。 ● フローティング 同一ネットワーク内の同時起動数を管理する場合。 インストール数は無制限 ※希望のライセンスを選択可能 	<h3>動作環境</h3> <ul style="list-style-type: none"> ● Windows版 OS : Windows10, 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 ※Fujitsu クラウドサービス HPC で動作確認済み
<ul style="list-style-type: none"> ● メディアパック インストーラやドキュメントを含むDVD-ROM 	

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
<https://www.fujitsu.com/jp/scigress/>

お問い合わせ先

SCIGRESSサポートセンター contact-sg@cs.jp.fujitsu.com