# 展示ブース・広告・支援のご紹介

## 展示ブース

株式会社クロスアビリティ

株式会社 HPC テック

コンフレックス株式会社

公益社団法人日本化学会

HPC システムズ株式会社

ヤトロ電子株式会社

## 広告

株式会社クロスアビリティ

コンフレックス株式会社

公益社団法人日本化学会

HPC システムズ株式会社

## 表彰支援

公益社団法人日本化学会

英国王立化学会　（The Royal Society of Chemistry）

## 開催支援

（一社）つくば観光コンベンション協会及びつくば市

# winmostar

Winmostar は、MO、DFT、MD などのシミュレーション環境を提供する統合 GUI ソフトウェアです。
20 年以上の歴史を持ち、現在もなお進化を続けています。

## 主な機能

1 **様々な原子・分子構造の作成**
分子、錯体、液体、アモルファス、
ポリマー、結晶、表面、界面など

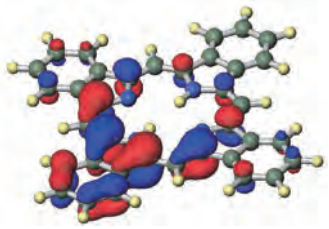
2 **シンプルかつ柔軟な計算条件の設定**
GAMESS、Gaussian、LAMMPS、
Gromacs、Quantum ESPRESSO などに対応

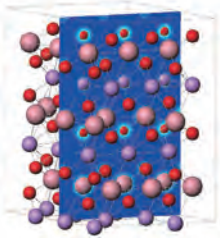
3 **様々な計算リソースのシームレスな切り替え**

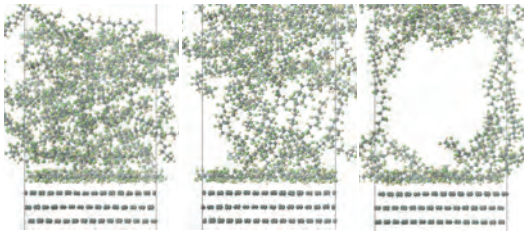
4 **膨大なファイル・プロセスの自動管理**

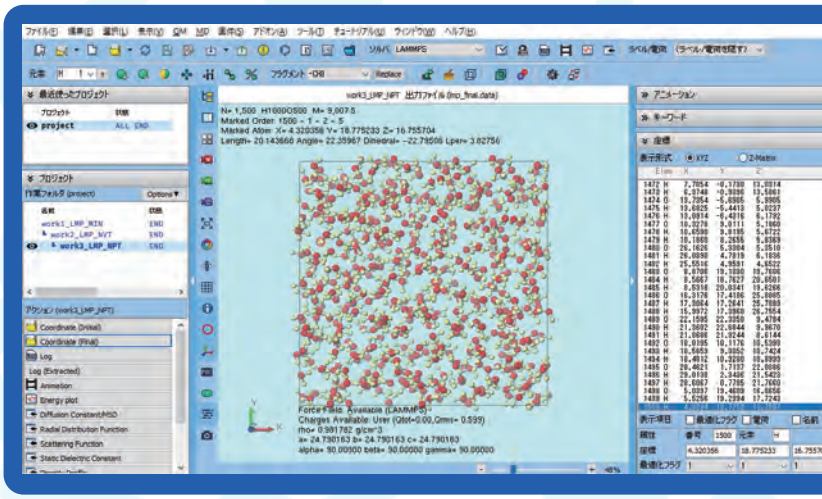
5 **シミュレーションデータの変換**

6 **計算結果の解析・可視化、各種物性算出**
45 種類以上の物性に対応









## 特徴

- ▶ 主要なシミュレーション手法を Winmostar だけで網羅
- ▶ 基礎原理の学習から受託計算まで充実したサポートで初心者でも安心
- ▶ 長年の開発・サポート実績を活用し高いコストパフォーマンス
- ▶ 実用的な入力ファイルを生成するのでソルバの学習に有用

### 最新バージョン V11 の新機能 (2022 年 4 月リリース)

・連続計算＆ファイルとジョブの自動管理
・複数のパラメータまたは構造への一括計算
・一部機能の高速化　など 155 点以上の改良

### 導入実績 (2022 年 10 月 4 日現在)

・メーカー 160 社、研究機関 26 機関、教育機関 105 機関で導入
・93 本の学術論文と 13 社の特許で引用
・74 の大学で授業・実習に利用、公的機関の講習会で採用

## 料金プラン (税別)

| | | |
|---|---|---|
| 特定ユーザライセンス | 民間企業 官公庁 | ¥ 180,000 ~ |
| | 教育機関 | ¥ 60,000 ~ |
| サイトライセンス | ¥ 1,440,000 ~ | |

全機能を 1 ヶ月間利用可能な無料トライアルと、
機能を限定した学生版および無償版を
Web から無料でダウンロードできます。

各ライセンスの詳細、ダウンロード、注文見積もりも Web にてご確認ください

winmostar GET STARTED

株式会社クロスアビリティ　東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル3階
https://x-ability.co.jp/

## Winmostar のターゲットとなる材料

| | |
|---|---|
| 有機化合物 | 冷媒、蓄熱材 |
| 触媒（錯体、微粒子） | 二次電池、燃料電池、太陽電池 |
| 有機半導体材料（OLED など） | 電解液、ポリマー電解質、固体電解質 |
| 塗料、色素 | 電子材料 |
| 薬剤 | パワー半導体 |
| 有機・無機ナノ複合材料 | 熱電材料 |
| ゴム、樹脂、フィルム、液晶 | 鋼材 |
| カーボン材料（CNT など） | 無機ガラス材料 |
| 潤滑油 | 多孔質体、MOF　など |

## Winmostar で計算できる原子・分子構造

| | |
|---|---|
| 有機分子 | 気液、液液、固気、固液、固固界面 |
| 錯体 | 分子結晶、無機結晶 |
| 液体・アモルファス・ガラス | 点欠陥、不純物置換した結晶、固溶体 |
| ポリマー（ホモ・ブロック・ランダム） | スラブ（表面）、粒界 |

## Winmostar で計算できる物性

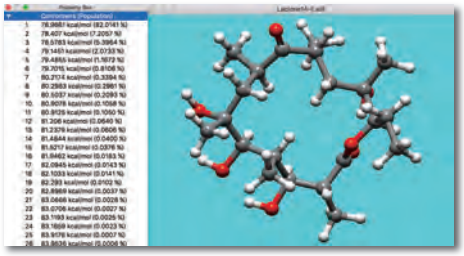
| | |
|---|---|
| IR、ラマンスペクト | 液体・アモルファスの動径分布関数、散乱関数 |
| UV-Vis スペクトル、蛍光波長 | 拡散係数・イオン伝導度 |
| NMR、XANES スペクトル | 粘度・熱伝導度・誘電率・誘電正接 |
| 熱力学量 | 表面張力・吸着量・吸着エネルギー |
| 比熱、自由エネルギー | 融点・沸点・蒸気圧・平衡密度 |
| 生成熱、活性化エネルギー、遷移状態の構造 | S-S 曲線、熱膨張率、ガラス転移温度、弾性率 |
| 分子軌道エネルギー、イオン化ポテンシャル | 蒸発熱、溶解度パラメータ、$\chi$パラメータ |
| 静電ポテンシャル、状態密度、バンド構造 | 誘電関数、仕事関数 |
| 分子・結晶の安定構造 | ゼーベック係数、電気伝導率、電子熱伝導率　など |

# 計算化学ソリューション

## コンフレックス株式会社

### CONFLEX&Interface

- 配座探索
- 構造最適化・基準振動解析
- 分子性結晶構造の最適化
- 結晶構造探索
- 結晶表面解析
- 動的反応座標(DRC)解析
- ホスト-リガンド配位探索
- Gaussian 連携
- 力場パラメーター設定
- GB/SA溶媒効果
- UV/Vis/CDスペクトル



### Gaussian&GaussView

- 分子軌道計算
- 構造最適化
- 遷移状態探索
- 熱化学的諸性質
- 分極率と超分極率
- ONIOM による大規模系の計算
- NMRスペクトル
- 励起状態計算
- 原子電荷・静電ポテンシャル 多極子モーメント
- IR/Raman/VCD/ ROAスペクトル

**配座空間探索**
**結晶構造探索**
**分子軌道計算**
**分子動力学計算**

### Amber

- 生体分子動力学計算
- QM/MM計算
- レプリカ交換法
- 自由エネルギー計算
- 一般有機分子力場
- NMRデータ精密化
- 生体膜シミュレーション

### 導入相談

- ソフトウェアの選定
- 最適な計算システムの提案
- 計算機の提供
- インストール作業

### ChemDraw

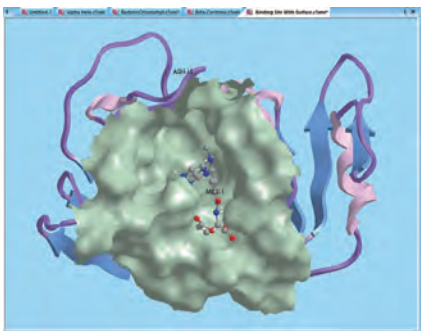
- 化学構造式の描画
- 構造式から化学名の生成、化学名から構造式の生成
- NMR シフト予測、MS フラグメント処理
- 化学反応における量論計算
- 計算インターフェース(CONFLEX、Gaussian等)

### 講習会

- 定期講習会（入門編・応用編）
- 目的に応じてカスタマイズした個別講習会

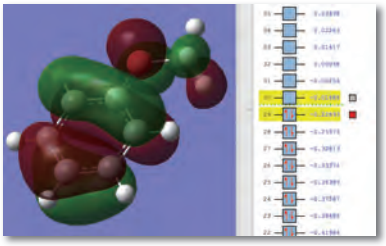
### 技術サポート

- 操作方法・計算方法に関するQ&A
- エラー終了した原因の解析と回避方法
- キーワードの使い方



### 受託計算

- 配座解析・結晶計算
- 生体分子動力学解析
- 分子軌道計算
- 各種スペクトル解析

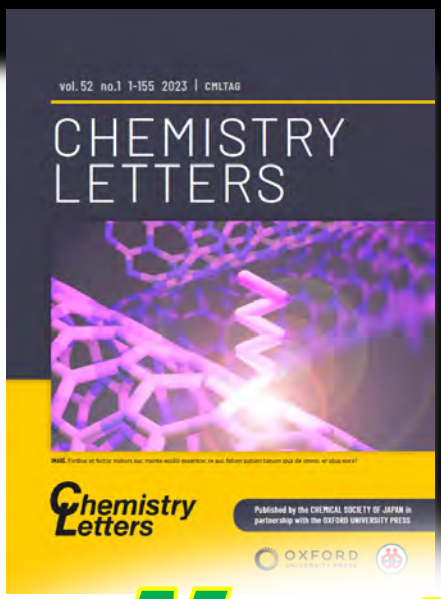


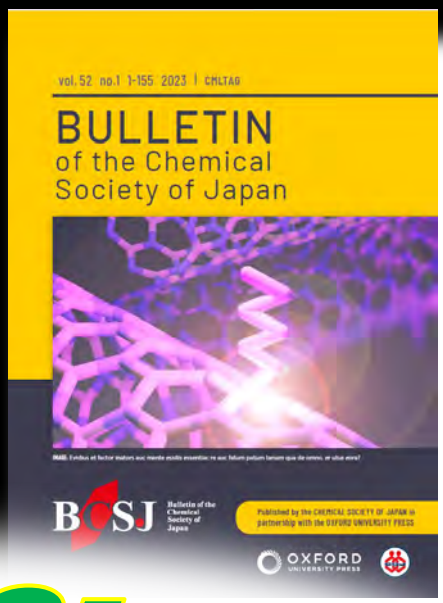
CONFLEX
HIGH PERFORMANCE
Conformation Analysis

https://www.conflex.co.jp/ E-mail: info@conflex.co.jp

# The Chemical Society of Japan
# Oxford University Press

# *Collaborative Publication*




# Next Stage

日本語詳細ページ

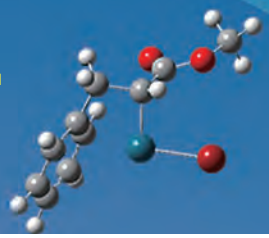
- **Faster Publication**
  Speed up the process from submission to publication.
- **Expanding Visibility**
  Acceleration of world-wide visibility of the published papers.
- **Accelerating OA**
  We will increase the number of the Open Access (OA) papers for promoting an open science.

反応経路・遷移状態 計算ソフトウェア

# Reaction plus Pro 2

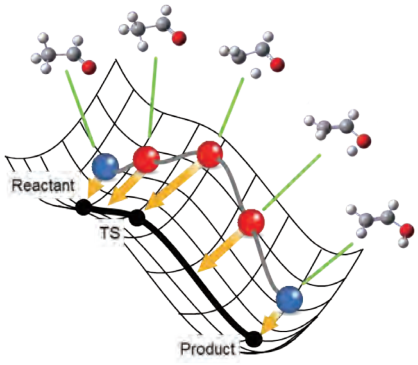
Reaction plus Express 2

## 簡単・手軽に反応メカニズムがわかる!!



## 基底状態の反応はもちろん、励起状態にも適応可能です

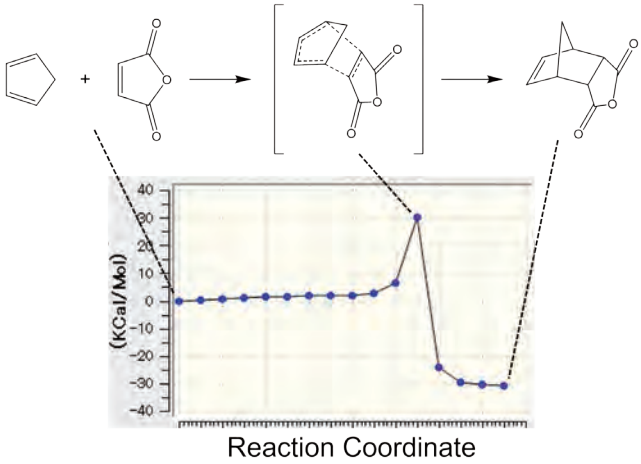
### Reaction plus Pro2 の特徴




- 反応経路や遷移状態が簡単・手軽に見つかる
- 反応の様子が動画でわかる
- 計算エンジンにGaussianを採用することにより高速化を実現

### Reaction plus Pro2 の計算例

Diels-Alder反応







# 有機化学のための量子化学計算入門

## Gaussianの基本と有効利用のヒント

東京都立大学准教授　博士(工学)　西長　亨
HPCシステムズ株式会社 計算化学シニアエキスパート　博士(工学)　本田　康
(共著)

1. 量子化学計算で何ができるか？
2. 計算実行のための環境づくり
3. 計算手法と基底関数
4. Gaussianの基本的な使い方
5. 構造最適化
6. 分子軌道
7. 基底状態の物性
8. 化学反応メカニズム
9. 開殻系の取り扱い
10. 励起状態の物性
11. 計算を有効活用するためのヒント

株式会社裳華房／B 5 判／224 頁／2 色刷／2022 年 6 月発行／ISBN 978-4-7853-3523-6　C3043

**定価 3,850 円**（本体 3,500 円＋税 10 %、送料込み）

**インターンシップ**

HPCシステムズでは、インターンの受け入れを実施しています。
詳しくは、QRコードか、もしくはメールアドレスからお問い合わせください。

採用担当まで
hpcs_hr@hpc.co.jp

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。※ 2022年7月現在の内容です。