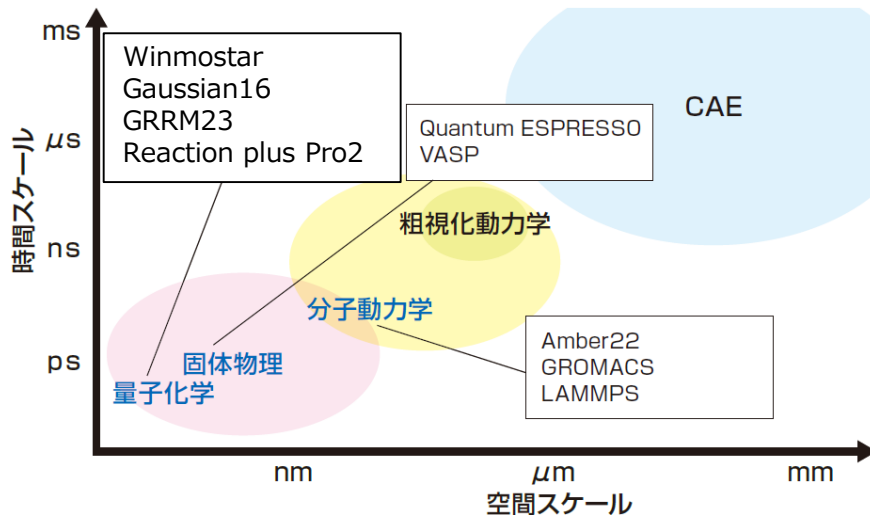


計算化学ソリューション

計算化学環境を実現するソフトウェア



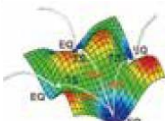
シミュレーションをすべての化学者に。統合的なGUIベースの計算化学環境を実現する計算化学ソフトウェア

Winmostar



電子状態計算や計算化学モデルについて最先端の手法や技術を提供
量子化学計算プログラム

Gaussian 16



1つの分子から生じる化学反応経路を、網羅的・自動的に探索できる画期的な計算プログラム

GRRM23



反応物と生成物と指定するだけで自動的に反応系の計算ができる

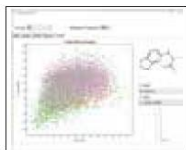
Reaction plus Pro 2

高機能材料開発AI MIソフトウェア「M-EVO®」



M-EVO®

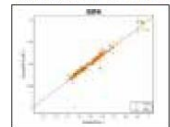
Pythonやデータサイエンスの知識がなくてもクリックで操作できるGUI
データベースいらずの
マテリアルズ
インフォマティクス



実験データが無くても始められる、多様な分子構造探索 <逆問題>

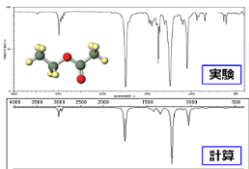
組成や実験条件の最適化

物性予測モデルの構築



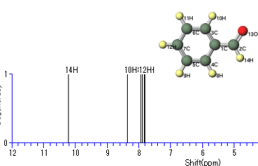
バイオ・創薬ソリューション

計算化学ソフトウェアWinmostarを用いて計算可能な事例を、一例としてご紹介します。



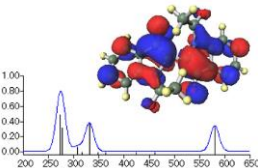
IR・ラマン計算とその解析

酢酸エチル、スチレン分子について、Winmostar で計算入力ファイルを作成して、B3LYP/6-311G**レベルで構造最適化及びIR・ラマンの量子化学計算を行いました。その計算結果ファイルをWinmostarで読み込み、スペクトル図にして、実験データと比較しました。IR・ラマンともに実験スペクトルをほぼ再現しています。



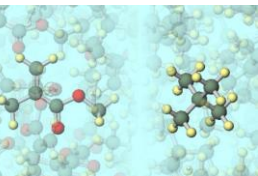
NMR化学シフト計算とその解析

ベンズアルデヒド分子について、Winmostarで計算入力ファイルを作成して、PCM法でクロロホルム(CHCl₃)溶媒効果を加えたB3LYP/6-311G**レベルで構造最適化、NMR化学シフトの量子化学計算を行いました。その結果ファイルをWinmostarで読み込み、¹H及び¹³C NMR化学シフトスペクトル図にして、実験データと比較しました。¹H、¹³Cどちらの計算も実験スペクトルをよく再現しています。



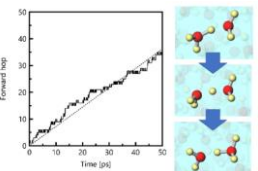
UV-Vis計算とその解析

インディゴ及びインディゴ誘導体について、Winmostarで計算入力ファイルを作成して、PCM法でクロロホルムの溶媒効果を加えたB3LYP/6-311G**レベルで構造最適化、TDDFT法で励起状態の計算を行いました。その結果をWinmostarで読み込み、UV-Visスペクトル図を作成しました。計算から得られた第一吸収ピークの波長とクロロホルム溶媒の実験値を比較し、傾向の一致を確認しました。電子の広がりとそのエネルギー、立体的な影響を計算から解析して、希望する吸収波長や色を持つ新たな分子設計の指針を立てることができます。



分子動力学計算による溶解度パラメータの評価

ある物質が別の物質の中に溶けやすいか否かを評価することは、様々な場面で重要となります。ヒルデブランドの溶解度パラメータは、蒸発熱を比体積で規格化した値です。力場さえ割り当てられれば分子動力学計算から算出することができます。Winmostar上で各種低分子化合物のパラメータを計算した場合、文献値の結果をある程度再現していることが分かりました。通常、物性値の算出作業は煩雑で大きな作業コストを伴いますが、Winmostarを用いるとマウス操作のみで手軽に実行でき、作業を大幅に効率化できます。



密度汎関数タイトバインディング法によるプロトン拡散係数の計算

プロトン移動反応は、酸・塩基反応、生体中の酵素触媒反応など化学の幅広い範囲における重要な素過程です。半経験的量子化学計算の一種である密度汎関数タイトバインディング (DFTB) 法と、高速手法である分割統治法を組み合わせたDCDFTBMDプログラムを用いて、水中におけるプロトン拡散を解析しました。その結果、実験値と近い値を取ることが確認されました。通常、複数の計算からなるMDの実施やソルバ間でのデータコンバートは煩雑で大きな作業コストを伴いますが、Winmostarを用いると作業を大幅に効率化できます。

研究開発者を強力にサポート

先端の基礎研究、素材・材料開発など、研究開発を多角的に支援するワンストップサービスを提供



- ✓ 計算化学、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)等の技術力で、強力な共同研究・支援・計算能力を提供
- ✓ 幅広い化学ソフトウェアをサポート
- ✓ 高度なシステムインテグレーション力
- ✓ 最先端ハードウェア企業の発掘力
- ✓ ベンダーとの長期的なパートナーシップ

システム構築・保守サポートから研究支援まで、お客様の研究内容やご要望に合ったトータルなソリューションをご提案します。



ハードウェア

科学技術計算向け高性能計算機
開発・製造



ソフトウェア

科学技術計算シミュレーション
ソフトウェアの販売・最適化



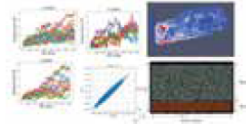
システムインテグレーション

計算速度の改善
並列化・高速化受託サービス
ソフトウェアのビルド・最適化



計算支援

計算化学受託計算サービス
量子化学・分子動力学セミナー



研究支援

研究コンサルティング・支援
計算化学・MIのソフトウェア開発



運用支援

計算機・クラウド
アプリケーション
保守・サポート・トレーニング



クラウドサービス

化学シミュレーション
クラウドサービス



製品情報・科学ニュース・技術情報等を発信しています
https://twitter.com/HPCS_marketing



導入事例



WEB導入事例

実験と計算の架け橋を目指して
～分子レベルの理解に基づく新しい分子性不斉触媒の開発～

https://www.hpc.co.jp/casestudy/case23_201604/



WEB導入事例

新しいマテリアルサイエンスを開拓するための
パラダイムシフトを創出

～「理論・実験・データ科学」の異分野融合～

https://www.hpc.co.jp/casestudy/case30_201811/



お問い合わせ



HPCシステムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

TEL : 03-5446-5531 FAX : 03-5446-5550

Mail : hpcs_sales@hpc.co.jp

WEB サイト : <https://www.hpc.co.jp/>



h p c

検索

<https://www.hpc.co.jp/>

販売店

Daitron ダイトロン株式会社

グループ事業推進部 新規市場開拓グループ

〒532-0003 大阪府大阪市淀川区宮原4-6-11

TEL : (06)6399-6004 FAX : (077)553-5022

<https://www.daitron.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。Intel、インテル、Intel ロゴ、Intel Inside、Intel Inside ロゴ、Centrino、Centrino Inside、Intel Viiv、Intel Viiv ロゴ、IntelPro、Intel vPro ロゴ、Celeron、Celeron Inside、Intel Atom、Intel Atom Inside、Intel Core、Core inside、Itanium、Itanium Inside、Pentium、Pentium Inside、Viiv Inside、vPro Inside、Xeon、Xeon Inside は、アメリカ合衆国およびその他の国における Intel Corporation の商標です。
AMD、AMD EPYC™、AMD Ryzen™、AMD Radeon™、Radeon Instinct™ は、アメリカ合衆国および/またはその他の国における Advanced Micro Devices, Inc. の商標です。NVIDIA、GeForce、CUDA、NVLINK、SLI、Tesla、Quadro、および SHIELD は、米国またはその他の国における NVIDIA Corporation の商標または登録商標です。
Microsoft、Windows は、米国 Microsoft Corporation の米国及びその他の国における商標または登録商標です。