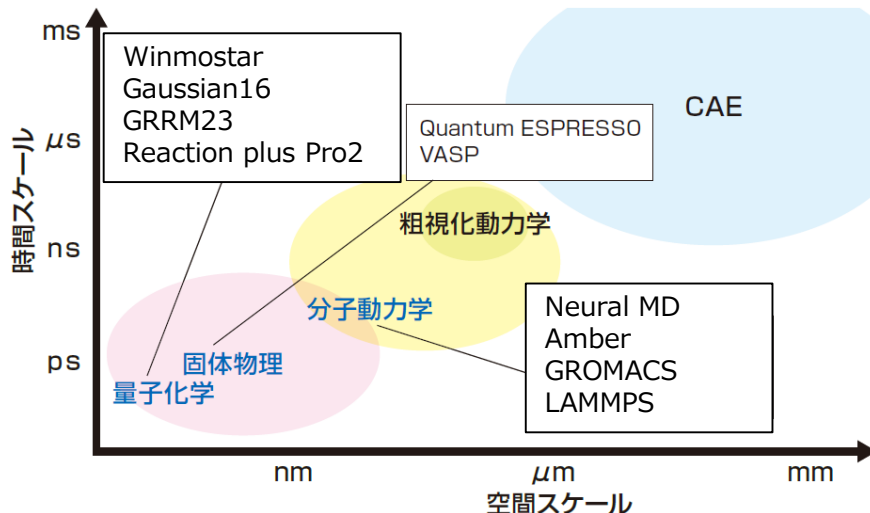


計算化学ソリューション

計算化学環境を実現するソフトウェア

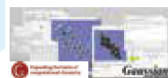


環境構築可能アプリケーション一例



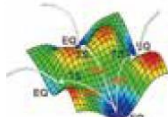
モデリング・計算条件設定が容易に行える統合GUI環境と、Neural Network Potentialに基づいた分子動力学計算ソフトウェア

NanoLabo/Neural MD



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

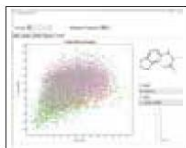
Reaction plus Pro 2

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

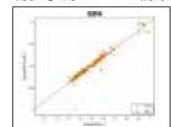


実験データが無くても始められる、多様な分子構造探索 <逆問題>

組成や実験条件の最適化



物性予測モデルの構築



解析事例

統合GUI Advance/NanoLabo とは

Advance/PHASEおよび、Quantum ESPRESSOやLAMMPSなどのオープンソースの材料解析ソフトウェアに対応した統合GUIです。Materials Projectなどの材料データベースを検索し、モデリング・計算条件設定が極めて容易に行えます。計算実行後は計算結果を瞬時にグラフィックス表示できます。



計算ソフトウェア Advance/Neural MD とは

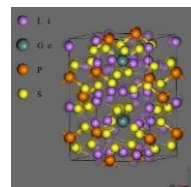
Neural Network Potentialに基づいた分子動力学計算のソフトウェアです。Quantum ESPRESSOにて出力された第一原理計算の結果を教師データとして、分子力場を作成します。この力場を利用して、LAMMPSにて分子動力学計算を実行します。

Neural Network Potentialの特徴

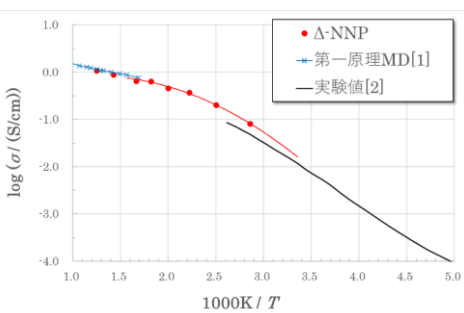
- 第一原理計算よりも高速、かつ、既存の分子動力学計算よりも高精度
- 未知の材料、未知の添加元素 など、既存の力場が無い系も取り扱い可能
- 研究者の勘や経験に依存しない、システムティックなシミュレーションを実現

Δ-NNP法によるリチウムイオン伝導体LGPSの伝導率計算

Li10GeP2S12(LGPS)は、室温で10⁻² S/cm以上の高いイオン伝導率有するリチウムイオン伝導体であり、全固体リチウムイオン電池における固体電解質としての利用が期待されています。この結晶に対して、新しいNeural Network力場法であるΔ-NNP法を適用して、イオン伝導率を計算します。第一原理MDではモデルサイズを大きくできず、イオンが激しく運動する高温領域でしかシミュレーションできません。一方、Neural Network Potentialを使用すると、常温でもシミュレーション可能で、イオン伝導率の実験値をよく再現しています。



Li10GeP2S12のイオン伝導率



T = 298.15K におけるイオン伝導率を、2次関数で補外して予測すると、 $\sigma = 1.6 \times 10^{-2}$ S/cm となりました。
実験値 1.2×10^{-2} S/cmにかなり近い数値です。
第一原理MDや既存NNPよりも低コストに高精度なイオン伝導率が予測できることから、LGPS以外の固体電解質への適用も期待されます。

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



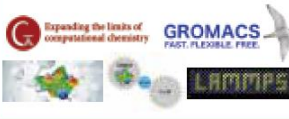
- ✓ 計算化学、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)等の技術力で、強力な共同研究・支援・計算能力を提供
- ✓ 幅広い化学ソフトウェアをサポート
- ✓ 高度なシステムインテグレーション力
- ✓ 最先端ハードウェア企業の発掘力
- ✓ ベンダーとの長期的なパートナーシップ

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



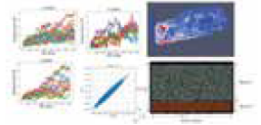
システムインテグレーション

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



ダイترون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 大阪市淀川区宮原4-6-11

電話 : 06-6399-6004

<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 Inside、Intel Viiv、Intel Viiv ロゴ、IntelVPro、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。