

# 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。



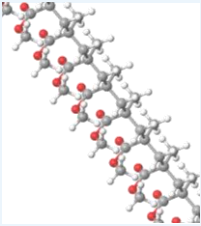
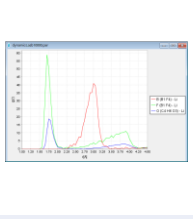
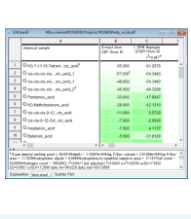
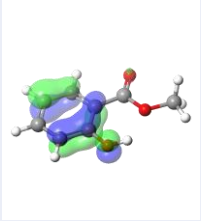
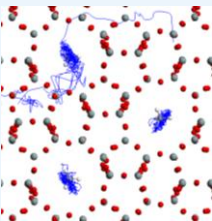
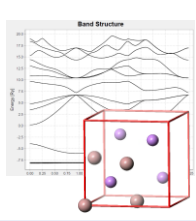
## 主な計算対象

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

<p><b>対応分子系</b></p>	<p>低分子、高分子、結晶、アモルファス、溶液、界面など</p>
<p><b>対応計算法</b></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><b>対応アプリ</b></p>	<p> <b>富士通ソフト</b> MO-G, MO-S, MD-ME, Mechanics, ZINDO, DGauss  <b>商用ソフト</b> Gaussian, CONFLEX  <b>オープンソース</b> GAMESS, LAMMPS, PHASE/0, 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"> <li>各種ポリマー</li> <li>液晶</li> <li>ランダムセル</li> <li>結晶テンプレート</li> </ul> 	<h3>解析</h3> <ul style="list-style-type: none"> <li>MD二次解析</li> <li>反応解析</li> </ul> 	<h3>情報管理</h3> <ul style="list-style-type: none"> <li>スプレッドシート</li> <li>プロパティシート</li> <li>分子ライブラリ</li> </ul> 
<h3>MO</h3> <ul style="list-style-type: none"> <li>構造最適化</li> <li>分子軌道</li> <li>赤外スペクトル</li> <li>紫外可視スペクトル</li> </ul> 	<h3>MD</h3> <ul style="list-style-type: none"> <li>熱力学量</li> <li>力学特性</li> <li>輸送係数</li> </ul> 	<h3>第一原理</h3> <ul style="list-style-type: none"> <li>バンド図</li> <li>状態密度図</li> <li>電気特性</li> <li>光学特性</li> </ul> 

## 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 GUI機能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
  - 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

<h4>MO</h4> <ul style="list-style-type: none"> <li> <b>MO I/F</b>                      分子軌道法の計算に必要なツール MOPAC連携機能                 </li> <li> <b>MO エンジン</b>                      富士通製：MO-G, MO-S                 </li> </ul>	<h4>MD</h4> <ul style="list-style-type: none"> <li> <b>MD I/F</b>                      分子動力学法の計算に必要なツール LAMMPS連携機能                 </li> <li> <b>MD エンジン</b>                      富士通製：MD-ME                 </li> </ul>	<h4>第一原理</h4> <ul style="list-style-type: none"> <li> <b>第一原理 I/F</b>                      PHASE/0, Quantum ESPRESSO連携機能                 </li> <li> <b>QSPR</b>                      ● QSPR                      複数化合物に対するバッチ処理, QSPR                 </li> </ul>
---	--	---

<h3>ライセンス管理</h3> <ul style="list-style-type: none"> <li> <b>スタンドアロン</b> 特定のPCのみで利用する場合。                 </li> <li> <b>フローティング</b> 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                 </li> </ul>	<h3>動作環境</h3> <ul style="list-style-type: none"> <li> <b>Windows版</b> OS : Windows10, 11                      CPU : Core i5 6000番以上推奨                      メモリ : 4GB以上推奨                 </li> <li> <b>Linux版</b> OS : RedHat Enterprise Linux 7, 8, CentOS 7, Ubuntu                      (計算エンジン専用)                      CPU : Core i5 6000番以上推奨                      メモリ : 4GB以上推奨                 </li> </ul> <p>※Fujitsu クラウドサービス HPC で動作確認済み</p>
--	--

## 富士通株式会社

ソーシャルソリューション事業本部 Healthy Living Life Science事業部

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

## お問い合わせ先

富士通コンタクトライン（総合窓口） 0120-933-200

受付時間 9時～12時および13時～17時30分（土曜・日曜・祝日・当社指定の休業日を除く）

[contact-sg@cs.jp.fujitsu.com](mailto:contact-sg@cs.jp.fujitsu.com)