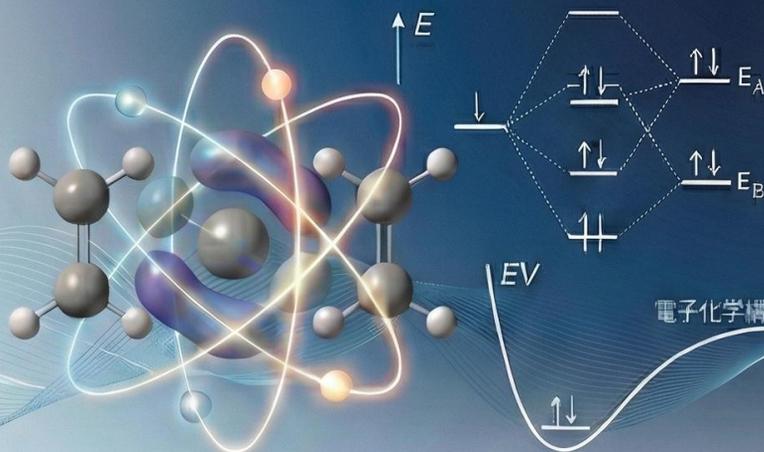


Molpro

量子化学計算ソフトウェア



妥協なき計算精度を求める研究者へ。 電子相関計算の「ゴールドスタンダード」

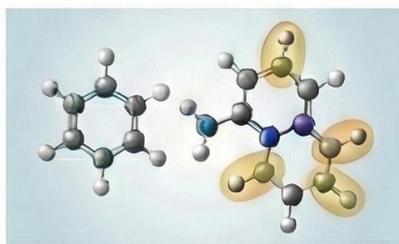
Molproは、一般的な密度汎関数法(DFT)では到達できない高精度な解析を必要とする研究開発の現場で、世界的に支持されている量子化学計算ソフトウェアです。特に「ポスト・ハートリーフォック法」の実装において卓越しており、非常に精密な電子相関の取り扱いが可能です。新素材開発におけるベンチマークデータの作成や、複雑な励起状態の解析など、「ここぞ」という場面で真価を発揮する専門ツールです。

主な特長 | Key Features



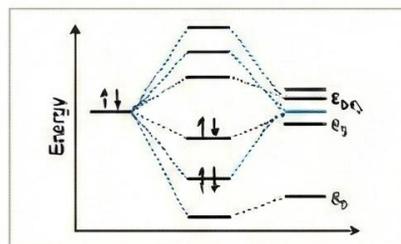
1. 究極の精度を、現実的なコストで実現【明示的相関法 F12】

明示的相関法F12は、現実的なコストで究極の精度を実現します。従来の手法では到達困難だった基底関数極限付近の精度を、大幅に少ない計算資源で実行可能です。



2. 大規模分子も高精度に解析可能【局所相関法】

局所相関法は、分子全体ではなく局所的な電子相関に注目して計算します。原子数の増加に伴う計算コストの急激な増大を抑制し、大規模分子の高精度解析を可能にします。



3. 複雑な電子状態を正確に記述【多参照法】

多参照法は、遷移状態や励起状態など、電子配置が一つに定まらない複雑な系を正確に記述します。DFT計算では困難な化学反応や光物性の理論研究に不可欠です。

利用シーン | Use Cases

- 新素材・触媒開発におけるベンチマークデータの作成
- 有機ELや光触媒など、光機能性材料の励起状態・緩和過程解析
- 燃焼化学や大気化学で求められる高精度な熱化学データの算出
- 創薬や結晶工学における分子間相互作用の精密評価

導入のポイント | Positioning

Gaussian (汎用型)	Molpro (特化型)
汎用的なDFT法に強み	高精度な電子相関法に強み
豊富な機能と標準化された操作性	F12法による圧倒的な高効率と精度

用途・解析規模・将来計画を見据えた最適なマシン構成をご提案

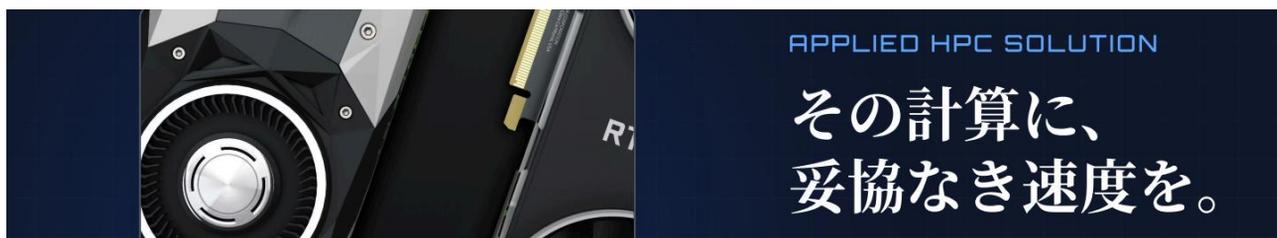
インテル® Xeon® Gold 6414U搭載 量子化学計算の分野に「最高峰の精度」を！



筐体	■ タワー筐体&4Uラックマウント対応 (レール：オプション)
基本ソフト	■ Ubuntu 22.04 インストール代行
プロセッサ	■ インテル® Xeon® Gold 6414U プロセッサ
	- 2.0GHz-2.6GHz/TB3.4GHz
	- 32コア/64スレッド
	- 60MB キャッシュL3
	- 1CPU/0UPI/DDR5-4800/8ch/TDP250W/XCC/Tray
チップセット	■ インテル® C741 チップセット
プロセッサ・クーラー	■ アクティブ・プロセッサ・ヒートシンク
メモリー	■ 512GB (64GB x8)
	- DDR5-5600 ECC Registered
	- 8スロット (8ch)
	- 最大1TB (128GB x8 RDIMM)
ストレージ	■ 960GB U.2 NVMe-SSD 高耐久仕様
	- PCI Express 4.0 (x4)
グラフィック	■ NVIDIA® A400
	- 4GB GDDR6
	- Mini DisplayPort : 4ポート
	- PCI Express 3.0 (x16形状x8動作)
光学ドライブ	■ 非搭載
ネットワーク (有線)	■ [1ポート] ギガビット
ネットワーク (IPMI)	■ [1ポート] IPMI2.0
サウンド	■ 2.1ch オーディオ
電源ユニット	■ 1,200W/100V 2,000W/200V
	- 80 Plus Platinum 認証 (100V)
	- 80 Plus Gold 認証 (200V)
	- 100V 電源ケーブル
入力装置	■ 有線キーボード・マウス (USB接続)
保証	■ 3年間センドバック方式ハードウェア保証

標準構成価格 **オープン価格**

- ※3年間センドバック方式ハードウェア保証
- ※ 本製品には「Molpro」は含まれておりません。



こちらの機種は、幅広いカスタマイズに対応しています。

お客様のあらゆる計算ニーズに応えるための最適解をご提供
仕様構成に関するご質問・ご相談はお気軽にお申しつけください。