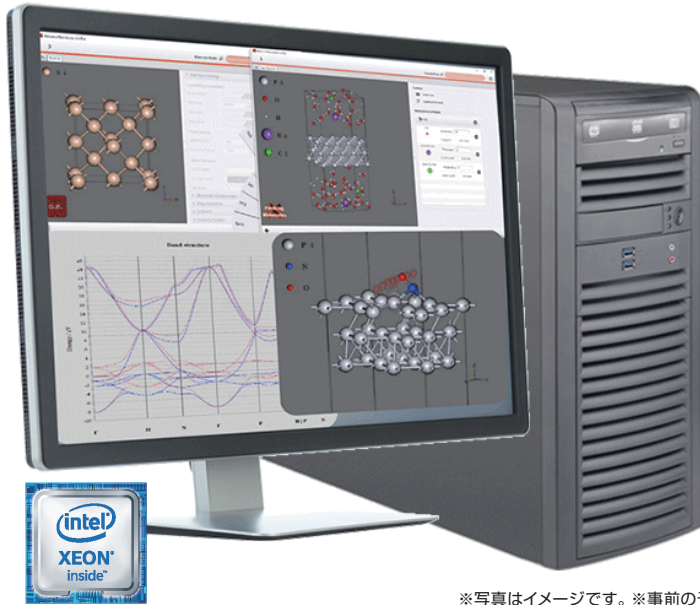


ナノ材料解析ソフトウェアに対応した統合GUI 「NanoLabo」搭載ワークステーション



Advance/PHASE

Quantum ESPRESSO

LAMMPS

- ・プリインストール出荷
- ・ディスプレイ、キーボード、マウス付属

※写真はイメージです。※事前の予告なしにディスプレイ、キーボード、マウス付属の仕様が変更されることがあります。

主な仕様

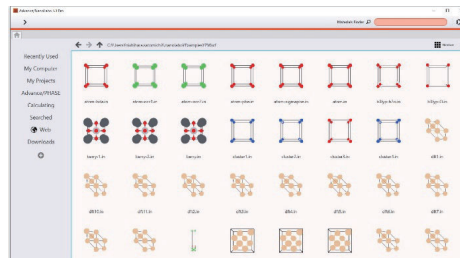
	教育機関向けモデル		企業向けモデル	
型番	スタンダード版 HPC3000-XCL108TS-A-A-NLS	プロフェッショナル版 HPC3000-XCL108TS-A-A-NLP	スタンダード版 HPC3000-XCL108TS-A-C-NLS	プロフェッショナル版 HPC3000-XCL108TS-A-C-NLP
CPU	Xeon® W-2295(18コア 3.0GHz)×1			
メモリ	128GB (16GB×8)		256GB (32GB×8)	
SSD	480GB (SATA, 480GB ×1)※システム用			
HDD	4TB (SATA, 1TB ×4)※データ用			
ODD	DVD-RWドライブ ×1			
GPU	Quadro® P400 v2			
モニタ	23.8インチ フルHD液晶			
OS	Windows 10 Pro for Workstations			
ソフトウェア	NanoLabo			
Pro版追加機能	—	不整合界面のモデリング機能	—	不整合界面のモデリング機能

NanoLabo でできること

- Advance/PHASE (アドバンスソフト社製品) および、Quantum ESPRESSO^{※1}やLAMMPS^{※2}など対応。
- Materials Project^{※3}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、結果を瞬時にグラフィックス表示できます。
- 不整合界面のモデリング機能が利用できます。^{※Pro版のみ}

NanoLabo の特長

- ・ 結晶構造のアイコン表示 (右図)
- ・ 化学式入力による材料データベース検索
- ・ 結晶、表面、界面、分子に対するモデリング
- ・ オープンソース計算エンジンのサポート
- ・ バンド構造、振動モード、反応経路残像表示、動力学アニメーションなどの多彩な可視化機能



NanoLabo の機能

Modeling		Calculation	
材料データベース	Materials Project ^{※3} PubChem ^{※4}	計算エンジン	Advance/PHASE Quantum ESPRESSO ^{※1} LAMMPS ^{※2}
結晶系	セル並進移動 スーパーセル 不純物置換 格子欠陥 空間群判定 Primitive セル変換 Standard セル変換	計算機能	SCF 計算、構造最適化 バンド構造、状態密度 第一原理 MD、古典 MD TD-DFT (UV スペクトル、誘電率) Phonon (バンド構造、状態密度) NEB 法、仕事関数 (ESM 法)
表面・界面系	任意の方位の表面 表面への分子吸着 不整合界面 (Pro のみ)	計算制御	ジョブスケジューラ NanoLabo-API for Python ^{※5}
分子系	有機分子の描画 溶媒分子充填	リソース	ローカルマシン 計算サーバー (SSH 接続) クラウド

NanoLabo サポート

アドバンスソフト株式会社

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西
 TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580
 URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp

^{※1} Quantum ESPRESSO は、GPL ライセンスにて配布されている第一原理計算のオープンソースソフトウェア。(https://www.quantum-espresso.org)

^{※2} LAMMPS は、GPL ライセンスにて配布されている分子動力学計算のオープンソースソフトウェア。(https://lammps.sandia.gov)

^{※3} Materials Project は、Lawrence Berkeley National Laboratory にて開発された材料インフォマティクス用のデータベース。(https://materialsproject.org)

^{※4} PubChem は、National Center for Biotechnology Information にて開発された生化学用のデータベース。(https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov)

^{※5} Advance/NanoLabo のオンラインマニュアルにて API 仕様を公開。(https://nanolabo-doc.readthedocs.io/ja/latest/python.html)

[※] 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 Viiiv、Intel Viiiv ロゴ、Intel vPro、Intel vPro ロゴ、Celeron、Celeron Inside、Intel Atom、Intel Atom Inside、Intel Core、Core Inside、Itanium、Itanium Inside、Pentium、Pentium Inside、Viiiv 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 Radeon™、Radeon™ は、Advanced Micro Devices, Inc の商標です。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。 [※] 2020年8月現在の内容です。



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
 営業時間: 9:00~18:00(土日、祝日、年末年始を除く)

TEL: 03-5446-5531 WEBサイト: <https://www.hpc.co.jp/>
 mail: hpcs_sales@hpc.co.jp