

COSMOlogic GmbH & Co. KG

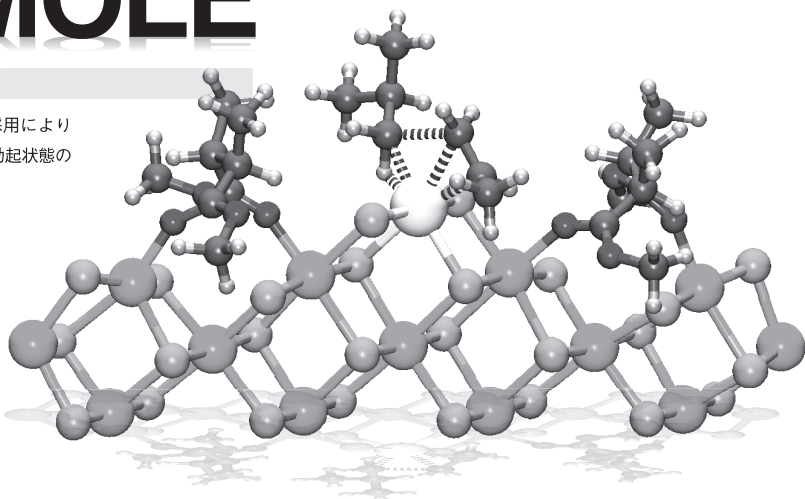
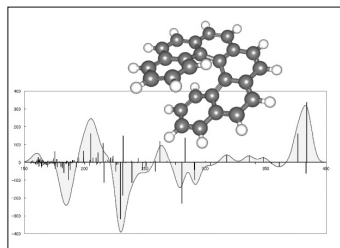
Your Competent Partner for
Computational Chemistry and Fluid Thermodynamics

高速な量子化学計算ソフトウェア

TURBOMOLE

構造・プロパティの高速な算出

TURBOMOLEではResolution of the identity (RI)法の採用により分子積分を高速化しています。比較的大きな分子の基底・励起状態のエネルギー・構造・プロパティ算出を高速に行います。



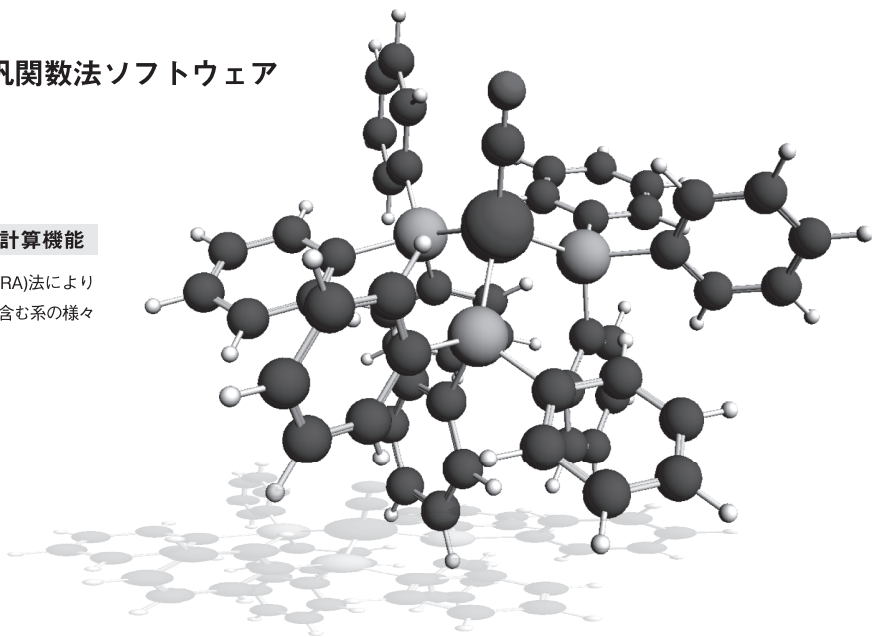
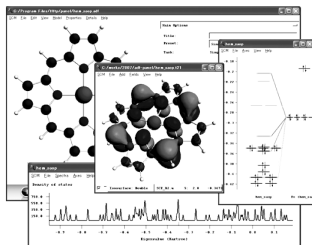
Scientific Computing & Modeling

様々な系に適用可能な密度汎関数法ソフトウェア

ADF

相対論の取り扱い・豊富なプロパティ計算機能

ADFではZeroth order regular approximation (ZORA)法により相対論効果を取り入れることができます。重原子を含む系の様々なプロパティ計算が可能です。



お問い合わせはこちらまで

Ryoka
Systems
Inc.

株式会社 菱化システム
科学技術システム事業部

〒104-0033 東京都中央区新川1-28-38 東京ダイヤビル3号館3階

TEL: 03-3553-9206
FAX: 03-3553-9207

URL: <http://www.rsi.co.jp/> e-mail: support@rsi.co.jp