



Winmostar

XA-CHEM-SUITE



2016年4月21日

ユーザビリティ／ロープライスを追求した計算化学／固体物理計算プリポストです。

Winmostar™は、分子モデリングから量子化学計算／分子動力学計算／固体物理計算の実行、計算結果の表示までをPC上で軽快かつ直感的に実現するパッケージソフトウェアです。

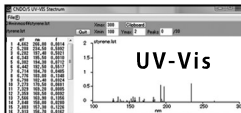
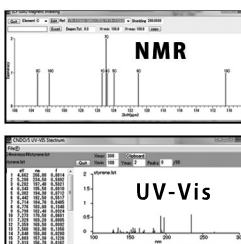
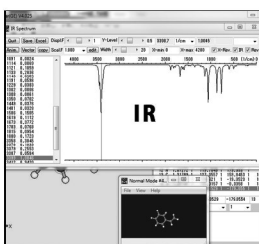
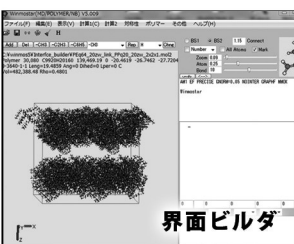
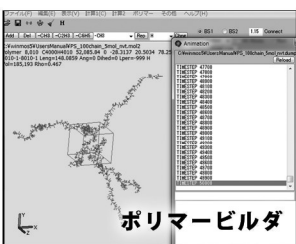
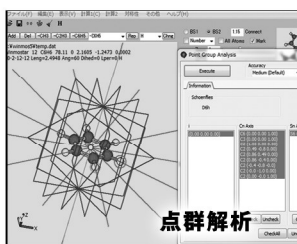
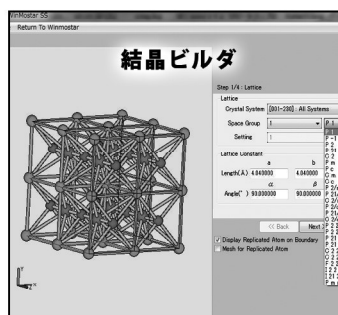
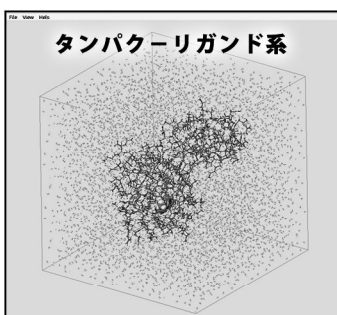
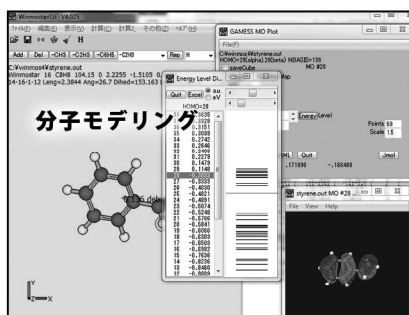
#p2n, pdb, cif, mol/mol2, sdf, gjf等の基本入力フォーマットに対応

無償版： 基本モデリング機能、30原子MOPAC6, 配座探索(Balloon)およびUV/Vis(CNDO/S)内蔵、点群解析、結晶ビルダ 等

ベーシック： 無償版＋原子数制限なしMOPAC6、GAMESS, Gaussian, NWChemの量子化学計算のI/F、ジョブ投入機能 等

MDオプション： Gromacs/LAMMPS/Amber I/F、ポリマー／界面ビルダ、自由エネルギー計算(ER, BAR)、DPD法 等

Solidオプション： Quantum ESPRESSO I/F、FDMNES (XAFSスペクトル) I/F、第一原理MD法、ESM法 等



■動作OS

Windows Vista/7/8/10 (VirtualBox/VMware fusion on Mac OSXも動作確認済)

■分子モデリング機能

- 原子単位の追加・変更・移動・削除、置換基の追加、クリーン（分子力学による簡易構造最適化）、配座探索、SMILES入力
- 部分回転・移動・削除・複製、Z-Matrix編集
- 結晶ビルダ、ポリマービルダ、界面ビルダ

■計算機能

- 内蔵：MOPAC6, Balloon(配座探索), CNDO/S(UV/Visスペクトル)
- 入力データ作成と起動：MOPAC, Gaussian, GAMESS/Firefly, NWChem, Gromacs, LAMMPS ※ジョブマネージャ及びジョブ投入機能搭載
- 分子表面積／体積／卵形度計算、アスペクト比／慣性半径計算、Sterimolパラメータ、PIO解析、自由エネルギー(ER法, BAR法)、DPD法

■可視化機能

- エネルギー準位／分子軌道／電荷、双極子／遷移モーメント、反応座標解析、点群解析
- UV/Vis, NMR, RAMAN/IRスペクトル、分子軌道表示、Gromacs各種MD解析ツール起動(LAMMPSコンバータ付)、バンド図、DOS表示
- プレゼンテーション機能：3Dプリンタ(OpenSCAD)、レイトレーシング(POV-Ray)、GIFアニメーション、特許出願資料用表示

■価格 ※3ヶ月間のフル機能トライアル版あり

- シングルライセンス(1年保守) 民間企業・官公庁 ¥90,000～ 教育機関 ¥45,000～ 個人 ¥22,500～ 学生 ¥4,500～ (学生証要)
 - 年間ライセンス(年間使用権＋保守) 企業・官公庁サイト、キャンパス、学科・専攻、研究室 ¥90,000～
- #年間ライセンスについては、5年分を3年分費用の一括支払でまとめ購入が可能です。
- #全事業所で有効になるコーポレートライセンス(年間使用権＋保守)は、会社規模に応じてお見積もりいたします。



X-Ability
クロスアビリティ

株式会社クロスアビリティ 〒113-0033 東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル3階

<https://winmostar.com/> E-Mail: question@winmostar.com