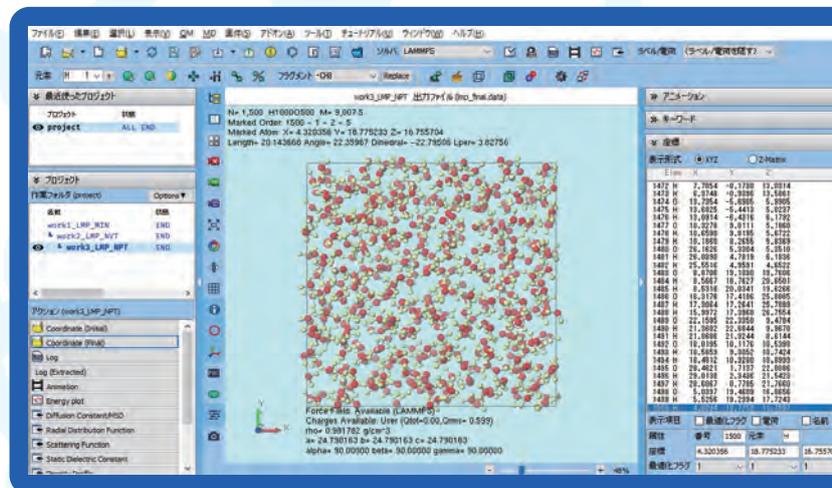
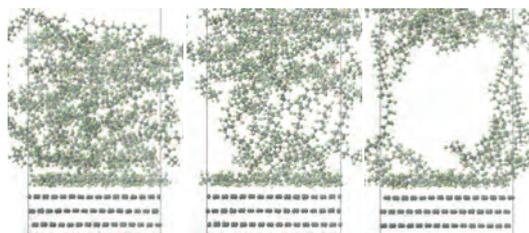
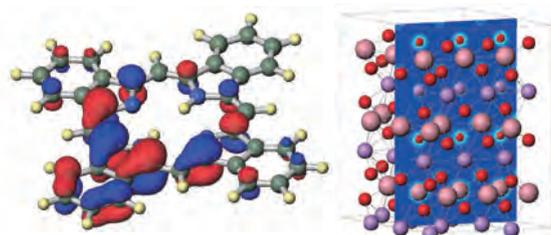


winmostar

Winmostar は、MO、DFT、MD などのシミュレーション環境を提供する統合 GUI ソフトウェアです。
20 年以上の歴史を持ち、現在もなお進化を続けています。

主な機能

- 1 様々な原子・分子構造の作成
分子、錯体、液体、アモルファス、
ポリマー、結晶、表面、界面など
- 2 シンプルかつ柔軟な計算条件の設定
GAMESS、Gaussian、LAMMPS、
Gromacs、Quantum ESPRESSO などに対応
- 3 様々な計算リソースのシームレスな切り替え
- 4 膨大なファイル・プロセスの自動管理
- 5 シミュレーションデータの変換
- 6 計算結果の解析・可視化、各種物性算出
45 種類以上の物性に対応



特徴

- ▶ 主要なシミュレーション手法を Winmostar だけで網羅
- ▶ 基礎原理の学習から受託計算まで充実したサポートで初心者でも安心
- ▶ 長年の開発・サポート実績を活用し高いコストパフォーマンス
- ▶ 実用的な入力ファイルを生成するのでソルバの学習に有用

最新バージョン V11 の新機能 (2022 年 4 月リリース)

- ・連続計算&ファイルとジョブの自動管理
- ・複数のパラメータまたは構造への一括計算
- ・一部機能の高速化 など 155 点以上の改良

導入実績 (2022 年 10 月 4 日現在)

- ・メーカー 160 社、研究機関 26 機関、教育機関 105 機関で導入
- ・93 本の学術論文と 13 社の特許で引用
- ・74 の大学で授業・実習に利用、公的機関の講習会で採用

料金プラン (税別)

特定ユーザー ライセンス	民間企業 官公庁	¥ 180,000 ~
	教育機関	¥ 60,000 ~
サイト ライセンス		¥ 1,440,000 ~

全機能を 1 ヶ月間利用可能な無料トライアルと、
機能を限定した学生版および無償版を
Web から無料でダウンロードできます。

各ライセンスの詳細、ダウンロード、注文見積もりも Web にてご確認ください

winmostar

GET STARTED



株式会社クロスアビリティ

東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル3階

<https://x-ability.co.jp/>

Winmostar のターゲットとなる材料

有機化合物	冷媒、蓄熱材
触媒（錯体、微粒子）	二次電池、燃料電池、太陽電池
有機半導体材料（OLED など）	電解液、ポリマー電解質、固体電解質
塗料、色素	電子材料
薬剤	パワー半導体
有機・無機ナノ複合材料	熱電材料
ゴム、樹脂、フィルム、液晶	鋼材
カーボン材料（CNT など）	無機ガラス材料
潤滑油	多孔質体、MOF など

Winmostar で計算できる原子・分子構造

有機分子	気液、液液、固気、固液、固固界面
錯体	分子結晶、無機結晶
液体・アモルファス・ガラス	点欠陥、不純物置換した結晶、固溶体
ポリマー（ホモ・ブロック・ランダム）	スラブ（表面）、粒界

Winmostar で計算できる物性

IR、ラマンスペクト	液体・アモルファスの動径分布関数、散乱関数
UV-Vis スペクトル、蛍光波長	拡散係数・イオン伝導度
NMR、XANES スペクトル	粘度・熱伝導度・誘電率・誘電正接
熱力学量	表面張力・吸着量・吸着エネルギー
比熱、自由エネルギー	融点・沸点・蒸気圧・平衡密度
生成熱、活性化エネルギー、遷移状態の構造	S-S 曲線、熱膨張率、ガラス転移温度、弾性率
分子軌道エネルギー、イオン化ポテンシャル	蒸発熱、溶解度パラメータ、 χ パラメータ
静電ポテンシャル、状態密度、バンド構造	誘電関数、仕事関数
分子・結晶の安定構造	ゼーベック係数、電気伝導率、電子熱伝導率 など

討論会日程表

5月21日(火)	5月22日(水)	5月23日(木)
9:20-10:20 登録受付	09:00-10:20 口頭発表 (2L01-2L04)	09:00-10:20 口頭発表 (3L01-3L04)
10:20-10:30 開会挨拶	10:20-10:30 休憩	10:20-10:30 休憩
10:30-11:50 口頭発表 (1L01-1L04)	10:30-11:50 ポスター発表1 (P101-P140)	10:30-11:50 ポスター発表2 (P201-P234)
11:50-13:00 休憩	11:50-13:00 休憩	11:50-13:00 休憩
13:00-14:20 口頭発表 (1L05-1L08)	13:00-14:40 産学特別セッション (IL01-IL04)	13:00-14:20 ポスター発表3 (P301-P333)
14:20-14:30 休憩		14:20-14:30 休憩
14:30-15:50 口頭発表 (1L09-1L12)	14:40-14:50 休憩 14:50-15:35 中野雅由先生追悼セッション (IL05-IL06) 15:35-15:40 休憩	14:30-15:50 口頭発表 (3L05-3L08)
15:50-16:00 休憩		15:50-16:00 休憩
16:00-17:20 口頭発表 (国際交流セッション1) (1L13-1L16)	15:40-16:40 口頭発表 (2L05-2L07) 16:40-16:45 休憩 16:45-17:15 奨励賞受賞講演 (IL07)	16:00-17:20 口頭発表 (3L09-3L12)
17:20-17:30 休憩	17:15-17:20 休憩	17:20-17:30 閉会挨拶
17:30-18:30 口頭発表 (国際交流セッション2) (1L17-1L19)	17:20-18:20 理論化学会総会 18:20-18:30 移動	
	18:30-20:30 懇親会 大学会館 筑波デミ	

Timetable of the 26th annual meeting of JSTC

May 21 (Tue)	May 22 (Wed)	May 23 (Thu)
9:20–10:20 Registration	09:00–10:20 Oral Presentation (2L01–2L04)	09:00–10:20 Oral Presentation (3L01–3L04)
10:20–10:30 Opening	10:20–10:30 Break	10:20–10:30 Break
10:30–11:50 Oral Presentation (1L01–1L04)	10:30–11:50 Poster Session 1 (P101–P140)	10:30–11:50 Poster Session 2 (P201–P234)
11:50–13:00 Lunch Break	11:50–13:00 Lunch Break	11:50–13:00 Lunch Break
13:00–14:20 Oral Presentation (1L05–1L08)	13:00–14:40 Industry–Academia Special Session (IL01–IL04)	13:00–14:20 Poster Session 3 (P301–P333)
14:20–14:30 Break		14:20–14:30 Break
14:30–15:50 Oral Presentation (1L09–1L12)	14:40–14:50 Break 14:50–15:35 Prof. Masayoshi Nakano Memorial Session (IL05–IL06) 15:35–15:40 Break	14:30–15:50 Oral Presentation (3L05–3L08)
15:50–16:00 Break		15:50–16:00 Break
16:00–17:20 Oral Presentation (International Session 1) (1L13–1L16)	15:40–16:40 Oral Presentation (2L05–2L07) 16:40–16:45 Break 16:45–17:15 Award Presentation (IL07)	16:00–17:20 Oral Presentation (3L09–3L12)
17:20–17:30 Break		17:20–17:30 Closing
17:30–18:30 Oral Presentation (International Session 2) (1L17–1L19)	17:15–17:20 Break 17:20–18:20 General Meeting of JSTC 18:20–18:30 Break	
	18:30–20:30 Banquet Tsukuba Demi	