winmostar

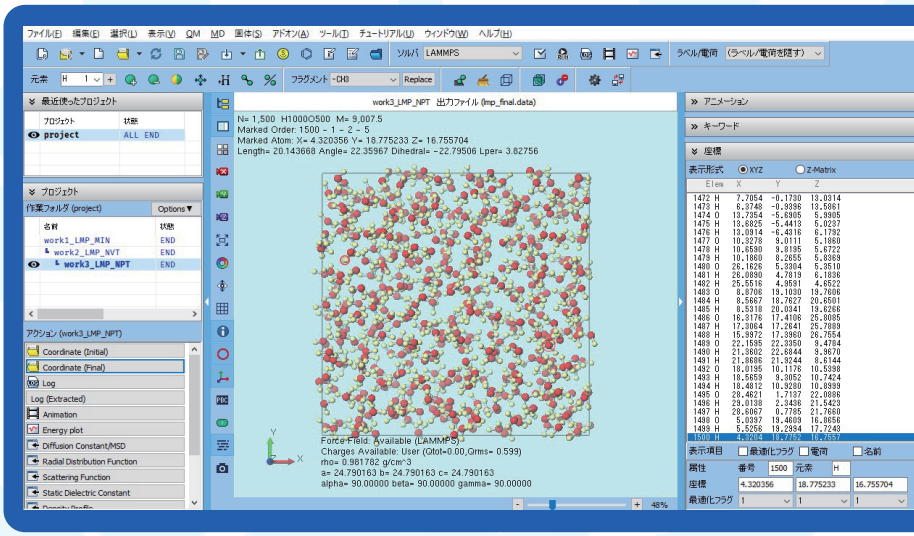
Winmostar は、原子スケールの各種シミュレータに関する統合 GUI ソフトウェアです。
MO、DFT、MD 計算のプリ・ポスト処理、ファイル・プロセス管理、データ可視化機能を提供します。
対応するシミュレータには GAMESS、Gaussian、LAMMPS、Gromacs、Quantum ESPRESSO などがあります。

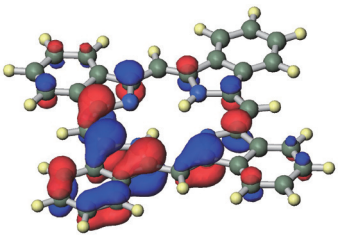
Winmostarでできること

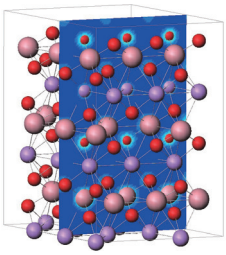
原子スケールの高精度なシミュレーションにより、実験で観察しづらい現象の可視化や候補材料のスクリーニングを行えます。

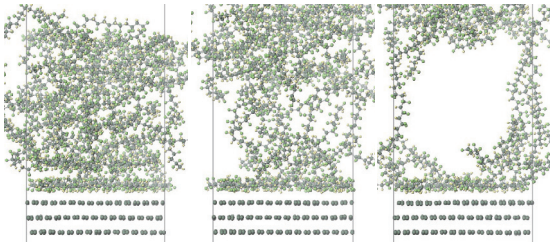
簡単なマウス操作で初心者でも 45 種類以上の物性を取得できます。

多彩な機能により最前線の研究者が学術論文レベルの計算を実行できます。









特徴

- 主要なシミュレーション手法をこれ 1 本で網羅
- 基礎理論の学習サポートから受託計算まで全ての困りごとに対応したサポートにより初心者でも安心
- 20 年以上に及ぶ長年の開発・サポート実績を活用し高いコストパフォーマンス

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