

How to compile applications installed in RCCS

[Caution] Please confirm the software license whether you can use it outside your laboratory.

LX 406Rh-2/110Rh-1/108Th-4G (cclx)

- ▶ [ABINIT-8.8.3](#)
- ▶ [AlphaFold2 \(2021/7/20\)](#)
- ▶ [AlphaFold2 \(2021/8/19\)](#)
- ▶ [Amber20-up9](#)
- ▶ [Amber20-up0](#)
- ▶ [Amber18-bf16](#)
- ▶ [Amber18-bf12](#)
- ▶ [Amber18-bf11-volta](#)
- ▶ [Amber18-bf1](#)
- ▶ [Amber16-bf15](#)
- ▶ [Anaconda3-2020.02 \(May 13, 2020\)](#)
- ▶ [Anaconda3-2019.03 \(Jul. 3, 2019\)](#)
- ▶ [Anaconda2-2019.03 \(Jul. 4, 2019\)](#)
- ▶ [CP2K-8.2.0](#)
- ▶ [CP2K-7.1.0](#) ([intel](#) / [gnu](#))
- ▶ [CP2K-6.1.0](#) ([intel](#) / [gnu](#))
- ▶ [DIRAC-19.0](#)
- ▶ [DIRAC-18.0](#)
- ▶ [FFmpeg-4.4](#)
- ▶ [GAMESS-2021Jun30 \(2021 R1\)](#)
- ▶ [GAMESS-2020Jun30](#)
- ▶ [GAMESS-2019Sep30](#)
- ▶ [GAMESS-2018Sep30](#)
- ▶ [GAMESS-2018Feb14](#)
- ▶ [GAMESS-2017Nov11](#)
- ▶ [GENESIS-1.6.0](#) ([CPU](#) / [GPU](#))
- ▶ [GENESIS-1.4.0](#) ([CPU](#) / [GPU](#))
- ▶ [GENESIS-1.3.0](#) ([CPU](#) / [GPU](#))
- ▶ [GENESIS-1.1.6](#) ([CPU](#) / [GPU](#))
- ▶ [Gromacs-2021.2](#) ([CPU\(gnu\)](#) / [GPU\(gnu\)](#) / [CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#))
- ▶ [Gromacs-2020.6](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2020.4](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2020.2](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2019.6](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2019.4](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2019.2](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2018.8](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2018.7](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2018.6](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2018.3](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2018.1](#) ([CPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2016.6](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-2016.5](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Gromacs-5.1.5](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [LAMMPS-29Oct20](#) ([CPU](#) / [CPU+GPU](#))
- ▶ [LAMMPS-7Aug19](#) ([CPU](#) / [CPU+GPU](#))
- ▶ [LAMMPS-22Aug18](#)
- ▶ [LAMMPS-16Mar18](#) ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Luscius-0.8.6](#)
- ▶ [Molpro2021.1.0](#)
- ▶ [Molpro2020.1.2](#) ([gcc](#) / [intel](#))
- ▶ [Molpro2019.2.3](#)
- ▶ [Molpro2019.1.2](#)
- ▶ [Molpro2018.2](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl44](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl33](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl27](#)
- ▶ [NAMD-2.13](#) ([CPU](#) / [CPU+GPU](#))
- ▶ [NBO-7.0.7](#)
- ▶ [NBO-7.0.2](#)
- ▶ [NWChem-6.8](#)
- ▶ [OpenMolcas v20.10](#)
- ▶ [OpenMolcas \(June 4, 2019\)](#)
- ▶ [OpenMPI-4.0.2 \(gcc, intel\)](#)
- ▶ [OpenMPI-4.0.0 \(gcc, intel\)](#)
- ▶ [OpenMPI-3.1.0 \(gcc, intel\)](#)
- ▶ [OpenMPI-2.1.3 \(gcc, intel\)](#)
- ▶ [Quantum Espresso 6.7](#) ([CPU](#) / [GPU](#))
- ▶ [Quantum ESPRESSO 6.5](#)

- ▶ [Quantum ESPRESSO 6.3](#)
- ▶ [Quantum ESPRESSO 5.4](#)
- ▶ [Siesta-4.0.2](#)
- ▶ [VMD-1.9.3](#)

Primergy RX300/CX2550 (ccpg)

- ▶ [ABINIT-7.8.2](#)
- ▶ [Amber16-bf3](#)
- ▶ [Amber14-bf11](#)
- ▶ [Amber14-bf10](#)
- ▶ [Amber14-bf0](#)
- ▶ [Amber12-bf21](#)
- ▶ [Amber12-bf7](#)
- ▶ [AutoDock-4.2.6](#)
- ▶ [GAMESS-2017Apr20](#)
- ▶ [GAMESS-2014Dec05](#)
- ▶ [GAMESS-2013May01](#)
- ▶ [GAMESS-2012May01](#)
- ▶ [GENESIS-1.1.5 \(CPU / GPU\)](#)
- ▶ [GENESIS-1.1.1 \(CPU / GPU\)](#)
- ▶ [GENESIS-1.1.0 \(CPU / GPU\)](#)
- ▶ [Gromacs-2016.3 \(CPU / GPU\)](#)
- ▶ [Gromacs-2016.1 \(CPU / GPU\)](#)
- ▶ [Gromacs-5.1.4 \(CPU / GPU\)](#)
- ▶ [Gromacs-5.1.2 \(CPU / GPU\)](#)
- ▶ [Gromacs-5.0.6](#)
- ▶ [Gromacs-5.0.4](#)
- ▶ [Gromacs-5.0](#)
- ▶ [Gromacs-4.6.6](#)
- ▶ [Gromacs-4.6.5](#)
- ▶ [Gromacs-4.6.1](#)
- ▶ [Gromacs-4.5.5](#)
- ▶ [Molcas-8.2](#)
- ▶ [Molcas-8.0sp1](#)
- ▶ [Molcas-8.0](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl19](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl5](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl0](#)
- ▶ [Molpro2012.1-pl37](#)
- ▶ [Molpro2012.1-pl25](#)
- ▶ [Molpro2012.1-pl15](#)
- ▶ [NAMD-2.11](#)
- ▶ [NAMD-2.9](#)
- ▶ [PSI-4.0b5](#)
- ▶ [Quantum ESPRESSO-6.1](#)
- ▶ [Quantum ESPRESSO-5.1.1](#)
- ▶ [SIESTA-3.1](#)
- ▶ [SMASH-2.2.0](#)
- ▶ [SMASH-2.1.0](#)
- ▶ [SMASH-2.0.0](#)
- ▶ [SMASH-1.1.0](#)

UV2000 (ccuv)

- ▶ [Amber16-bf3](#)
- ▶ [Amber14-bf10](#)
- ▶ [Amber14-bf0](#)
- ▶ [Amber12-bf21](#)
- ▶ [Amber12-bf7](#)
- ▶ [GAMESS-2017Apr20](#)
- ▶ [GAMESS-2014Dec05](#)
- ▶ [GAMESS-2013May01](#)
- ▶ [GAMESS-2012May01](#)
- ▶ [GENESIS-1.1.5](#)
- ▶ [GENESIS-1.1.1](#)
- ▶ [GENESIS-1.1.0](#)
- ▶ [Gromacs-5.1.4](#)
- ▶ [Gromacs-5.1.2](#)
- ▶ [Gromacs-5.0.6](#)
- ▶ [Gromacs-5.0.4](#)
- ▶ [Gromacs-5.0](#)
- ▶ [Gromacs-4.6.6](#)
- ▶ [Gromacs-4.6.5](#)
- ▶ [Gromacs-4.5.5](#)
- ▶ [Molcas-8.2](#)
- ▶ [Molcas-8.0sp1](#)
- ▶ [Molcas-8.0](#)

- ▶ [Molpro2015.1-pl19](#)
 - ▶ [Molpro2015.1-pl5](#)
 - ▶ [Molpro2015.1-pl0](#)
 - ▶ [Molpro2012.1-pl37](#)
 - ▶ [Molpro2012.1-pl25](#)
 - ▶ [Molpro2012.1-pl15](#)
 - ▶ [PSI-4.0b5](#)
 - ▶ [SMASH-2.2.0](#)
 - ▶ [SMASH-2.1.0](#)
 - ▶ [SMASH-2.0.0](#)
 - ▶ [SMASH-1.1.0](#)
-