

## パッケージプログラム状態一覧(分子科学)

最終更新: 2025/2/21

### コンパイラ・ライブラリ

システム標準のものなどの一部を除き、/apl 以下に導入されています。

名前	バージョン	備考
GCC	8.5.0*	(システム標準)
	9.2.1	module: gcc-toolset/9 (gcc-toolset-9)
	10.3.1	module: gcc-toolset/10 (gcc-toolset-10)
	11.2.1	module: gcc-toolset/11 (gcc-toolset-11)
	12.2.1	module: gcc-toolset/12 (gcc-toolset-12)
	13.1.1	module: gcc-toolset/13 (gcc-toolset-13)
AOCC	5.0.0	module: aocc/5.0.0
	4.2.0	module: aocc/4.2.0
	4.1.0	module: aocc/4.1.0
	4.0.0*	module: aocc/4.0.0
	3.2.0	module: aocc/3.2.0
AOCL	5.0.0	module: aocl/5.0.0-aocc5.0 (AOCC でビルド), aocl/5.0.0-gcc13.2 (GCC でビルド)
	4.2.0	module: aocl/4.2.0-aocc4.2 (AOCC でビルド), aocl/4.2.0-gcc13.1 (GCC でビルド)
	4.1.0	module: aocl/4.1.0-aocc4.1 (AOCC でビルド), aocl/4.1.0-gcc13.1 (GCC でビルド)
	4.0	module: aocl/4.0-aocc4.0 (AOCC でビルド), aocl/4.0-gcc11.2 (GCC でビルド)
	3.2.0	module: aocl/3.2.0-aocc3.2 (AOCC でビルド), aocl/3.2.0-gcc11.2 (GCC でビルド)
Python [1]	3.9.18	
	3.6.8*	(/usr/bin/python3)
	2.7.18*	(/usr/bin/python2)
	3.10.13 (base) 3.12.2 (gpuenv)	miniforge3 環境(/apl/conda/20240305; conda_init.sh か conda_init.csh を source し てください)
	3.10.9	miniforge3 環境(/apl/conda/20230214; conda_init.sh か conda_init.csh を source し てください)
NVIDIA HPC SDK	24.9	module: nvhpc/24.9, nvhpc/24.9-byo, nvhpc/24.9-nompi
	24.3	module: nvhpc/24.3, nvhpc/24.3-byo, nvhpc/24.3-nompi
	23.9	module: nvhpc/23.9, nvhpc/23.9-byo, nvhpc/23.9-nompi
	23.5	module: nvhpc/23.5, nvhpc/23.5-byo, nvhpc/23.5-nompi
	22.11	module: nvhpc/22.11, nvhpc/22.11-byo, nvhpc/22.11-nompi
Intel oneAPI Compiler Runtime [2]	2025.0.4, 2025.0, 2024.2.1, 2024.2, 2024.1.0, 2024.0.2, 2024.0, 2023.2.0, 2023.1.0, 2023.0.0, 2022.2.1, 2022.0.2	module: compiler-rt/(version)
	2025.0.0.1	module: mkl/2025.0.0.1
	2025.0	module: mkl/2025.0

名前	バージョン	備考
Intel MKL	2024.2	module: mkl/2024.2
	2024.1	module: mkl/2024.1
	2024.0	module: mkl/2024.0
	2023.2.0	module: mkl/2023.2.0
	2023.1.0	module: mkl/2023.1.0
	2023.0.0	module: mkl/2023.0.0
	2022.2.1	module: mkl/2022.2.1
	2022.0.2	module: mkl/2022.0.2
Intel MPI	2021.14.1	module: intelmpi/2021.14.1
	2021.14	module: intelmpi/2021.14
	2021.13	module: intelmpi/2021.13
	2021.12	module: intelmpi/2021.12
	2021.11	module: intelmpi/2021.11
	2021.10.0	module: intelmpi/2021.10.0
	2021.9	module: intelmpi/2021.9
	2021.8	module: intelmpi/2021.8
	2021.7.1	module: intelmpi/2021.7.1
	2021.5.1	module: intelmpi/2021.5.1
CUDA	12.6 Update 2	module: cuda/12.6u2
	12.4 Update 1	module: cuda/12.4u1
	12.2 Update 2	module: cuda/12.2u2
	12.1 Update 1	module: cuda/12.1u1
	12.0*	module: cuda/12.0
	11.6	module: cuda/11.6
	11.2	module: cuda/11.2
Open MPI	5.0.6, 5.0.5, 5.0.1 4.1.8, 4.1.6, 4.1.5, 3.1.6	module: openmpi/(バージョン) (各コンパイラ 向けのパッケージ有)
HPC-X	2.16 (Open MPI 4.1.5)	module: openmpi/4.1.5-hpcx2.16 (各コンパ イラ向けのパッケージ有)
	2.13.1 (Open MPI 4.1.5)	module: openmpi/4.1.5-hpcx (各コンパイラ向 けのパッケージ有)
	2.11 (Open MPI 4.1.4)	module: openmpi/4.1.4-hpcx (各コンパイラ向 けのパッケージ有)
MVAPICH	3.0, 2.3.7	module: mvapich/(バージョン) (GCC, AOCC 向けパッケージ有り)
Julia	1.10.0	module: julia/1.10.0
	1.8.5	module: julia/1.8.5
	1.6.7 (LTS)	module: julia/1.6.7
Apptainer/Singularity	1.3.1	(singularity もしくは apptainer で呼び出し可 能)

\*: デフォルトのバージョン

[1]: pip3 install (パッケージ名) --user のようにすることで、自身のホームディレクトリにパッケージを追加することもできます。完全な独自環境が欲しい場合には、[miniforge](#) 等での構築もご検討ください。なお、conda 環境の読み込みには時間がかかる場合があります (通常は初回読み込み時のみ; lustre ファイルシステムの仕様が原因で、解消は難しいです)。特定の少数パッケージが必要な場合は pip3 でホームディレクトリ以下に導入することを推奨します。

[2]: 共用領域にコンパイラ本体はインストールされていません。コンパイラが必要な場合は oneAPI Base Toolkit や oneAPI HPC Toolkit をご自身のディレクトリにインストールしてください。

以下のパッケージがインストールされています。(公式ページへのリンクが黒文字で表記されているものは、1/25 時点では未導入ですが、導入予定のものです)プログラムの詳しい使用法は公式のドキュメント等を参照してください。各計算ノードとログインサーバーの /apl 以下にインストールされています。ビルドに関する情報は[こちらのページ](#)にまとめられています。

名前	内容
ABINIT-MP	A software for fast Fragment-Molecular-Orbital (FMO) calculations.
AlphaFold	AI program for predictions of protein structure.
AMBER	Package of molecular simulation programs.
CENSO	Program for evaluating structure ensembles at DFT level.
CP2K	A quantum chemistry and solid state physics software package.
CREST	A program for the automated exploration of the low-energy molecular chemical space.
CRYSTAL	General-purpose programs for the study of crystalline solids.
DFTB+	Fast and efficient versatile quantum mechanical simulation software package
DIRAC <sup>(注22)</sup>	Computes molecular properties using relativistic quantum chemical methods (named after P. A. M. Dirac).
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system.
Gaussian	Ab initio molecular orbital calculations.
GENESIS	Molecular dynamics and modeling software for bimolecular systems such as proteins, lipids, glycans, and their complexes.
GROMACS	Fast, Free and Flexible MD
GRRM	Automated Exploration of Reaction Pathways.
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator.
OpenMolcas	Quantum chemistry software.
Molpro	Complete system of ab initio programs.
NAMD	Scalable molecular dynamics program.
NBO	Discovery tool for chemical insights from complex wavefunctions.
NTChem <sup>(注17)</sup>	Comprehensive new software of ab initio quantum chemistry made in Riken-RCCS from scratch.
NWChem	Computational chemistry tools that are scalable both in their ability to treat large scientific computational chemistry problems
ORCA	An ab initio quantum chemistry program package
PSI4	Open-source suite of ab initio quantum chemistry programs designed for efficient, high-accuracy simulations of a variety of molecular properties.
Quantum ESPRESSO	Integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale.
Reaction Plus	Program to obtain the transition state and reaction path along the user's expected reaction mechanism.
SIESTA	Efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.
GaussView	Viewer for Gaussian 09 / 16.
Molden	Visualization program of molecular and structure.
VMD	Molecular graphics viewer

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
ABCluster	3.0	○ (2023/11/28)	
ABINIT-MP	v2r8	○ (2025/1/7)	
	v2r4	○ (2023/2/21)	
	v1r22	○ (2023/2/21)	
ADF <sup>(注9)</sup>		(入手不可)	
	3.0.0 (2025/1/16)	△ (2025/1/16)	推論部 GPU 必須。 モデルパラメータは各自で申請、 ダウンロードする必要有り

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
AlphaFold	3.0.0 (2024/11/26)	△ (2024/11/26)	(同上)
	2.3.2	△ (2024/2/8) <sup>☆</sup>	
	2.3.1	△ (2023/2/6) <sup>☆</sup>	
	2.2.0	△ (2022/3/14) <sup>☆</sup>	
	2.1.1	△ (2021/11/8) <sup>☆</sup>	
	2.1.0	△ (-/-) <sup>☆</sup>	
	2.0.0 (2021/8/19)	△ (2021/8/23) <sup>☆</sup>	
	2.0.0 (2021/7/20)	△ (2021/7/26) <sup>☆</sup>	
Amber	24-update1	○ (2024/6/11) <sup>☆</sup>	(AmberTools24-update2)
	22-update4	○ (2023/8/25) <sup>☆</sup>	(AmberTools23-update4)
	22-update1	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup>	(AmberTools22-update4)
	20-update13	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup>	(configure でビルド)
AutoDock	4.2.6	○ (2023/11/24)	
AutoDock-GPU	1.5.3	○ (2023/11/24) <sup>☆</sup>	
AutoDock Vina	1.2.5	○ (2023/11/24)	
CENSO	1.2.0	○ (2024/5/22)	(バイナリ版) ENSO 2.0.2 の anmr と nmrplot.py を手動で追加
ColabFold	1.5.5	○ (2024/2/16)	ローカル DB を使用
CP2K	2024.3	○ (2024/10/24)	
	2024.2	○ (2024/8/22)	
	2023.1	○ (2023/4/6)	
	9.1	○ (2023/1/-)	
CREST	3.0.1	○ (2024/5/21)	
CRYSTAL	23-1.0.1	○ (2024/7/19)	(注21)
	17-1.0.2	○ (2023/1/-)	
Dalton	2020.1	○ (2024/11/8)	
DFTB+	23.1	○ (2023/7/19) <sup>☆</sup> MPI / OpenMP	MPI 版と OMP 版を用意
DIRAC	23.0	○ (2023/5/8)	
	19.0	○ (2023/1/27)	
GAMESS	2024-R2(Jul15)	○ (2024/10/31)	(NBO 7.0.10 有効)
	2023-R2(Sep30)	○ (2023/12/7)	(NBO 7.0.10 有効)
	2022-R2(Sep30)	○ (2023/1/-)	(NBO 7.0.7 有効)
	2021-R1(Jun30)	○ (2023/1/-)	(NBO 7.0.7 有効)
Gaussian	16.C.02	○ (2022/3/14) <sup>☆</sup>	(NBO 7.0.10 有効)
	16.C.01	○ (2019/8/2)	(NBO 7.0.10 有効)
	16.B.01	○ (2018/3/12)	
	09.E.01	○ (2015/12/24)	
GENESIS	2.1.4	○ (2025/1/10) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2.1.2	○ (2024/1/16) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2.0.3	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup> CPU / GPU	

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
GROMACS	2024.5	○ (2025/1/27) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2024.4	○ (2024/11/5) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2024.2	○ (2024/5/16) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2023.5	○ (2024/5/7) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2023.4	○ (2024/1/26) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2023.2	○ (2023/8/9) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2022.6	○ (2023/7/12) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2022.4	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2021.7	○ (2023/4/14) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2021.6	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	2021.4	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
GRRM	23	○ (2024/1/11)	利用には申請が必要です。 (マルチノード並列対応)
	17(注5)	○ (2021/1/27)	(マルチノード並列対応)
	14	○ (2015/7/29)	
LAMMPS	29Aug2024 Update 1	○ (2025/2/21) <sup>☆</sup> CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	29Aug2024	○ (2024/9/6) <sup>☆</sup> CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	2Aug23	○ (2023/10/16) <sup>☆</sup> CPU(GCC,INTEL) / GPU	Intel MPI
	23Jun22 Update 2	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup> CPU / GPU	(netcdf off)
		○ (2023/4/18) <sup>☆</sup> CPU / GPU	Intel MPI
	29Sep21 Update 3	○ (2023/4/18) <sup>☆</sup> CPU / GPU	Intel MPI
29Sep21	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup> CPU / GPU	(netcdf off)	
LigandMPNN		△ (2024/3/27) <sup>☆</sup>	2024/3/27 最新コード
Molpro <sup>(注2)</sup>	2024.3.0	△ (2024/11/15)	
	2024.2.0	△ (2024/9/9)	
	2024.1.0	△ (2024/3/11)	
	2023.2.0	△ (2023/10/11)	
	2023.1.0	△ (2023/9/19)	
	2022.3.0	△ (2023/1/-)	(HPC-X)
△ (2023/5/18)		(MVAPICH)	

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
	2022.2.2	△ (2023/1/-)	
	2021.3.1	△ (2023/5/10)	
	2015.1-44	△ (2023/1/-)	
NAMD	3.0.1	○ (2024/10/31) <sup>☆</sup> MPI / SMP / SMP+CUDA	
	3.0	○ (2024/7/5) <sup>☆</sup> MPI / SMP / SMP+CUDA	
	3.0b7	○ (2024/5/23) <sup>☆</sup> MPI / SMP / SMP+CUDA	
	3.0b6	○ (2024/3/6) <sup>☆</sup> MPI / SMP / SMP+CUDA	
	3.0b2	○ (2023/4/10) <sup>☆</sup>	(GPU 版のみ)
	2.14	○ (2023/1/-) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
NBO	7.0.10	△ (2023/2/14)	
	7.0.7	△ (2023/1/-)	
NTChem	2013.13.0.0	○ (2023/4/28)	
NWChem	7.2.2	○ (2024/3/5) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	7.0.2	○ (2023/3/6)	
	6.8	○ (2023/1/-)	ReactionPlus 向け
OmegaFold	1.1.0	○ (2024/6/12) <sup>☆</sup>	
OpenMM	8.1.0	○ (2023/12/5)	
OpenMolcas	24.10	○ (2024/11/18)	
	23.06	○ (2023/7/25)	
	22.10	○ (2023/3/6)	
	21.10	○ (2023/3/6)	
ORCA	6.0.1	○ (2024/11/6)	(利用前に登録が必要です)
	5.0.4	○ (2023/3/20)	
	5.0.3	○ (2022/2/22)	
	4.2.1	○ (2020/1/8)	
Parallel CONFLEX <sup>(注9)</sup>			
ProteinMPNN		△ (2023/10/26) <sup>☆</sup>	2023/10/25 最新コード
PSI4	1.9.1	○ (2024/3/5)	
	1.7	○ (2023/1/30)	
Quantum ESPRESSO	7.4.1	○ (2025/2/12) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	7.4	○ (2025/1/24) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	7.3	○ (2024/2/6) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	7.2	○ (2023/4/11) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
	6.8	○ (2023/1/26) <sup>☆</sup> CPU / GPU	
ReactionPlus	1.0	○ (2018/1/22)	
RFdiffusion		△ (2023/10/26) <sup>☆</sup>	2023/10/25 最新コード

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
RFDiffusion AA		△ (2024/3/27) <sup>☆</sup>	2024/3/27 最新コード
SIESTA	5.2.2	○ (2025/2/19)	
	5.0.1	○ (2024/7/4) OpenMPI / IntelMPI	Open MPI 版と Intel MPI 版を用意
	5.0.0	○ (2024/5/29) OpenMPI / IntelMPI	Open MPI 版と Intel MPI 版を用意
	4.1.5	○ (2023/1/-) MPI / OpenMP	MPI 版と OMP 版を用意
TURBOMOLE <sup>(注3)</sup>	7.9	○ (2024/12/12) <sup>☆</sup>	
	7.8.1	○ (2024/11/12) <sup>☆</sup>	
	7.8	○ (2023/12/18) <sup>☆</sup>	
	7.7	○ (2023/7/18) <sup>☆</sup>	
	7.6	○ (2021/12/23)	
VASP <sup>(注4)</sup>		(入手不可)	
xTB	6.7.0	○ (2024/5/7)	
	6.5.1	○ (2024/5/22)	

X11 転送が可能であれば以下の GUI アプリケーションもログインサーバーで利用可能です。X11 転送は Windows ならば MobaXterm が一番手軽かと思います。(WSLg, Xming, VcXsrv などもあるかもしれません。) mac ならば XQuartz を導入、起動した上で ssh に -XY オプションを追加した上で接続すれば利用できます。

名前	バージョン	起動コマンド	導入日
GaussView	6.1.1	gview6	△ (2019/10/29)
	6.0.16	/apl/gaussian/16b01/gv/gview.sh	△ (2017/2/2)
	5.0.9	gview5	△ (2013/3/13)
iMolpro	1.0.1	/apl/molpro/1.0.1/bin/molpro-*	○ (2024/3/8)
Luscus	0.8.6	/apl/luscus/0.8.6/bin/luscus	○ (2023/10/4)
Molden	7.2.1	/apl/molpro/7.2.1/bin/molpro	○ (2023/2/6)
VMD	1.9.4 alpha (2022/4/27)	/apl/vmd/1.9.4a57/bin/vmd	○ (2023/1/-)
XCrySDen	1.6.2	module load xcrysdn/1.6.2 実行後に xcrysdn	○ (2024/8/23)

○: module 有り

△: 対応する module 無し

☆: GPU版有

## 注意事項

(注2) molproは、2025年9月15日にライセンス失効します。毎年更新予定。

(注3) 国内にいる非営利ユーザーのみ利用可能。2026年2月にライセンス失効する。毎年更新予定。

(注4) 本センターでは導入できません。ユーザーが独自にインストールすることは可能です。

(注5) [公式マニュアル](#)や計算科学研究センター作成の「GRRM実行サンプル解説」([GRRM14用](#))についてもご覧ください。

(注9) [ADF](#), [Parallel CONFLEX](#) はライセンス費用が高額であるため、本センターでは導入できません。

(注17) NTCHEMを用いて得た成果を発表するときには引用義務があります。詳しくは[公式ページ](#)や[公式マニュアル](#)をご覧ください。

(注21) CRYSTALを使用するためにはバージョン、ユーザー毎にライセンス同意書に署名が必要です。CRYSTAL17で登録済みの場合でもCRYSTAL23を使うためには別途登録が必要です。郵送等で同意書がRCCSに届いた後、CRYSTAL23 or/and CRYSTAL17が利用可能になります。(CRYSTAL23ライセンス同意書) (CRYSTAL17ライセンス同意書)

(注22) DIRACを使った計算を論文にする場合、[このページ](#)に示されたリファレンスの引用義務があります。

添付	サイズ
<a href="#">CRYSTAL17のライセンス同意書</a>	255.58 KB
<a href="#">CRYSTAL23のライセンス同意書</a>	314 KB

