

アプリケーションライブラリーの構築方法

[注意] 研究室外のコンピューターに使えるか、一度ライセンスをご確認ください。

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

- ▶ [ABINIT-8.8.3](#)
- ▶ [Amber18-bf16](#)
- ▶ [Amber18-bf12](#)
- ▶ [Amber18-bf11-volta](#)
- ▶ [Amber18-bf1](#)
- ▶ [Amber16-bf15](#)
- ▶ [Anaconda3-2019.03 \(2019/7/3\)](#)
- ▶ [Anaconda2-2019.03 \(2019/7/4\)](#)
- ▶ CP2K-6.1.0 ([intel](#) / [gnu](#))
- ▶ [DIRAC-18.0](#)
- ▶ [GAMESS-2018Sep30](#)
- ▶ [GAMESS-2018Feb14](#)
- ▶ [GAMESS-2017Nov11](#)
- ▶ GENESIS-1.3.0 ([CPU](#) / [GPU](#))
- ▶ GENESIS-1.1.6 ([CPU](#) / [GPU](#))
- ▶ Gromacs-2019.2 ([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-22Aug18](#)
- ▶ LAMMPS-16Mar18 ([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))
- ▶ [Luscius-0.8.6](#)
- ▶ [Molpro2019.1.2](#)
- ▶ [Molpro2018.2](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl33](#)
- ▶ [Molpro2015.1-pl27](#)
- ▶ NAMD-2.13 ([CPU](#) / [CPU+GPU](#))
- ▶ [NBO-7.0.2](#)
- ▶ [NWChem-6.8](#)
- ▶ [OpenMolcas \(2019/6/4\)](#)
- ▶ [OpenMPI-4.0.0 \(gcc, intel\)](#)
- ▶ [OpenMPI-3.1.0 \(gcc, intel\)](#)
- ▶ [OpenMPI-2.1.3 \(gcc, intel\)](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [Amber11-bf19](#)
- ▶ [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](#)
- [Quantum ESPRESSO-5.0.1](#)
- [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](#)
- [GEMESIS-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](#)
- [Quantum ESPRESSO-5.0.1](#)
- [SMASH-2.2.0](#)
- [SMASH-2.1.0](#)
- [SMASH-2.0.0](#)
- [SMASH-1.1.0](#)