

提供中のサービス

計算資源サービス

分子科学、基礎生物学および生理学の研究の発展に寄与する研究を行うために、CPUやディスク等の計算資源を利用できるサービスをアカデミックな機関に在籍する研究者に対して提供しています。

アプリケーションライブラリーサービス

センターの利用者がすぐに科学技術計算を開始できる様に各種アプリケーションライブラリーを提供しています。また、研究者の方から提供されたプログラムを共同利用で使えるようにしています。

Gaussian、Molproなどの電子状態計算プログラムやAmber、NAMDなどの分子動力学プログラムが整備されています。

[パッケージプログラム状態一覧はこちら](#)

データベースサービス

分子科学研究データベースとして次の3件を登録しています。特に QCLDB はその設計段階から関与し、現在も毎年あるデータ更新に協力しています。

- ▶ [QCLDB](#) (量子化学文献データベース)
- ▶ [FCDB](#) (力の定数に関するデータベース)
- ▶ [Segmented Gaussian Basis Set](#) (Sapporo基底関数のデータベース)

それぞれWebからの利用を可能です。

[公開サービス](#)のページも参照してください。