



材料研究開発を加速する、計算化学ソリューションのパイオニア シュレーディンガー株式会社

分子シミュレーション技術の発展により、ナノレベルの現象をコンピュータ・シミュレーションで扱うことができるようになってきました。また、シミュレーションと機械学習の組み合わせによってできることの幅が広がりつつあります。

シュレーディンガーは、最新の分子シミュレーションや機械学習、その両者を融合した技術を駆使して、お客様の材料開発における解析力の強化と高効率化を支援します。

展示ブースでは、専門技術者が最新技術を解説し、お客様からのご質問にお答えします。

実験データの大規模統計解析と高精度ナノスケールシミュレーションによる 分子構造・ナノ構造に基づく物性予測, 解析, 設計

量子計算による分子設計

- 密度汎関数法/Post-HF法/TDDFT
- HOMO/LUMO/pKa/ホッピング伝導/溶媒効果/IR/Raman/UV-vis/VCD/NMR
- 有機EL発光材料, 電荷輸送材料/有機太陽電池/LIB電解質/触媒

液体・ポリマー物性予測

- 熱可塑性樹脂/熱硬化性樹脂
- GPUによる高速分子動力学計算
- 密度/配座解析/架橋構造/ヤング率/ガラス転移温度/分子拡散/熱膨張/膨潤/応力ひずみ曲線/SP値

結晶・表面・界面

- 周期系第一原理計算
Quantum ESPRESSO
- 電極や触媒上の化学反応
- 半導体/分子性結晶/MOF

統計解析・機械学習

- 全自動回帰分析ツールAutoQSAR
- 強力な記述子・フィンガープリント生成
- カーネルPLS法/Dendritic fingerprint/自己組織化マップ/ベイズ分類/NN法
- 実験データベース構築, 利用
- 外部データベースから分子データを補完

柔軟で強力なGUI/CUI ユーザーインターフェース

- 分子シミュレーション/
機械学習プラットフォーム MS-Maestro
- あらゆる機能をPythonスクリプトで操作
Schrödinger Python API
- Windows/Mac/Linux 対応

お問い合わせは info-japan@schrodinger.com
詳細は www.schrodinger.com/materials-science

