



電子的構造計算やナノスケールの材料設計のための
オープンソースコードの統合パッケージ

QUANTUM ESPRESSO

× アプライド オリジナルワークステーション



QUANTUM ESPRESSO — 機能概要

QUANTUM ESPRESSO は、電子的構造計算やナノスケールの材料設計のためのオープンソースコードの統合パッケージです。密度汎関数法、平面波近似モデル、擬ポテンシャルモデルに基づく計算が可能です。さらに、基底状態計算、構造最適化、遷移状態および最小エネルギー経路、非経験的分子動力学、反応プロパティ、光学のプロパティ、量子遷移などの計算が可能です。

Quantum Espressoは、CPUやGPUの並列処理性能を使って処理されるため、PCのスペックが高い程効率が上昇します。

Quantum Espressoの動作にお勧めのワークステーション ①

■OS：未選択

■CPU：【2CPU】インテル® Xeon® Silver 4514Y プロセッサー
(2.0GHz-2.6GHz/TB3.4GHz/16C/32T/30MB LLC/DDR5-4400 1DPC)

■メモリ：256GB (16GB x16) DDR5-4800 Registered ECC DIMM

■SSD：960GB SATA3-SSD (Samsung PM893 採用 | 6Gb/s |
R:550MB/s W:530MB/s | 高耐久 MTBF：200万時間)

■グラフィック：【1GPU】NVIDIA® T400 4GB-GDDR6 (miniDisplayPort x3)
PCIe 3.0 (x16) 384 コア ※ MiniDP to DP 変換アダプタ 1 本付属

■電源：1500W/200V (1200W/100V) 80 Plus Platinum 認証 | ATX3.0

■マザーボード：インテル® C741 チップセット

■3年間センドバック方式ハードウェア保証付き

■静音マウス・日本語キーボード付属(有線)



ポイント ① 2基のハイエンドCPU



Quantum Espressoは、CPUコア数を活用した並列処理を行うため、出来る限り多いコア数がある方が高いパフォーマンスを発揮することができます。そこで、16コアのXeonを2基搭載することで、通常のPCとはかけ離れた圧倒的な処理速度を実現します。

ポイント ② 256GBの大容量メモリ



高い性能のCPUには、それ相応のメモリも必要になります。通常であれば重たい処理になると段々速度が低下する場面でも、256GBあれば平気です。

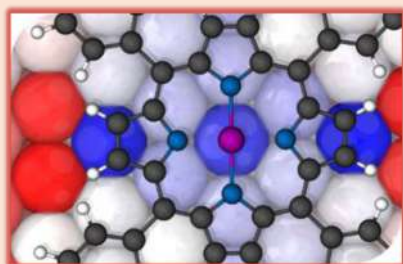
CERVO Grasta
WST-XS4514Yx2S3Q960TSD

1,488,000 税込 円



電子的構造計算やナノスケールの材料設計のための
オープンソースコードの統合パッケージ

× アプライド オリジナルワークステーション



QUANTUM ESPRESSO — 機能概要

QUANTUM ESPRESSO は、電子的構造計算やナノスケールの材料設計のためのオープンソースコードの統合パッケージです。密度汎関数法、平面波近似モデル、擬ポテンシャルモデルに基づく計算が可能です。さらに、基底状態計算、構造最適化、遷移状態および最小エネルギー経路、非経験的分子力学、反応プロパティ、光学のプロパティ、量子遷移などの計算が可能です。

Quantum Espressoは、CPUやGPUの並列処理性能を使って処理されるため、PCのスペックが高い程効率が増します。

Quantum Espressoの動作にお勧めのワークステーション ②

- OS : Windows® 11 Pro for Workstations
- CPU : 【2CPU】 インテル® Xeon® Gold 6530 プロセッサー
(2.1GHz-2.6GHz/TB4.0GHz/32C/64T/160MB LLC/DDR5-4800 1DPC)
- メモリ : 512GB (64GB×8) DDR5-4800 1.2V 2RANK
- SSD : 1.92TB M.2 NVMe-SSD (R:5500MB/s | W:2000MB 高耐久)
+増設SSD(:D) : 7.68TB SATA3-SSD (Samsung採用)
- グラフィック : 【1GPU】 NVIDIA® T400 4GB-GDDR6 (miniDisplayPort x3)
PCIe 3.0 (x16) 384 コア ※ MiniDP to DP 変換アダプタ 1 本付
- 電源 : 1500W/200V (1200W/100V) 80 Plus Platinum 認証 | ATX3.0
- マザーボード : インテル® C741 チップセット
- 3年間センドバック方式ハードウェア保証付き
- 静音マウス・日本語キーボード付属(有線)



ポイント ① 2基のハイエンドCPU



Quantum Espressoは、CPUコア数を活用した並列処理を行うため、出来る限り多いコア数がある方が高いパフォーマンスを発揮することができます。そこで、32コアのXeonを2基搭載することで、通常のPCとはかけ離れた圧倒的な処理速度を実現します。

ポイント ② 512GBの大容量メモリ



高い性能のCPUには、それ相応のメモリも必要になります。通常であれば重たい処理になると段々速度が低下する場面でも、512GBあればいつでも快適に動作します。

CERVO Grasta
WST-XS6530x2S3Q192TTNVM

2,698,000円 税込