

材料解析ソフトウェア用統合 GUI ソフトウェア 仕様書

令和 8 年 2 月

地方独立行政法人大阪産業技術研究所

森之宮センター

1. 調達背景及び目的

化学式・分子構造・分子名等を入力することで材料データベースを自動検索し、適切なモデリング・計算条件を設定するなど計算入力ファイルを自動で生成し、計算実行および計算結果の可視化を行うため、以下に示す材料解析ソフトウェア用統合グラフィックユーザーインターフェース（GUI）ソフトウェアを購入する。

2. 調達物品の名称、数量及び構成内訳

名称： 材料解析ソフトウェア用統合 GUI ソフトウェア

数量： 1 式

内訳： ソフトウェア 1 式

同ソフトウェアの使用許諾 1 ライセンス

3. 機器の性能、機能、規格等

ソフトウェア は次の仕様を満たすものとする。

- 3-1. 化学式・分子構造・分子名を入力すると、インターネット経由でデータベース（Materials Project および PubChem）に接続して、分子構造または結晶構造を検索して取得する機能を有すること。
- 3-2. 結晶に対するモデリング（セル並進移動、スーパーセル、不純物置換、格子欠陥、空間群判定 Primitive セル変換、Standard セル変換）の機能を有すること。
- 3-3. 表面・界面に対するモデリング（任意の方位の表面、表面への分子吸着、不整合界面）の機能を有すること。
- 3-4. 分子に対するモデリング（有機分子の描画、溶媒分子充填、高分子モデル）の機能を有すること。
- 3-5. LLM(大規模言語モデル)をベースとした生成 AI と連携して、ユーザーが入力した自然言語に基づく材料モデルの自動生成機能を有すること。
- 3-6. オープンソース計算科学ソフトウェア「Quantum ESPRESSO」または「LAMMPS」で以下に示す計算を実行するための計算入力ファイルを自動で作成できること。
SCF 計算、構造最適化、バンド構造、状態密度、第一原理 MD、古典 MD、TD-DFT（UV 可視スペクトル、誘電率）、Phonon（バンド、状態密度、IR スペクトル）、NEB 法、XAFS/EELS スペクトル、NeuralMD 用学習データ作成、CPMD、GIPAW（NMR スペクトル）。
- 3-7. オープンソース計算科学ソフトウェア「Quantum ESPRESSO」および「LAMMPS」で計算した以下に示す結果を可視化する機能を有すること。
ログファイル表示、収束状況チェック、構造の動画表示（構造最適化、分子動力学）、バンド構造、状態密度、各種スペクトル表示、振動モード、任意のテキストエディタによるログファイル表示、分子動力学の統計処理（拡散係数、粘性係数、熱伝導係数）、3D 表示（電荷密度、ポテンシャル、スピン偏極）。
- 3-8. オープンソース計算科学ソフトウェア「Quantum ESPRESSO」計算の進捗状況を可視

化する機能を有すること。

- 3-9. オープンソース計算科学ソフトウェア「LAMMPS」計算の実行の最中であっても、動力学の様子をアニメーション表示し、MP4 形式にて保存する機能を有すること。
- 3-10. プログラミング言語「Python」と連携して操作するためのインターフェースが備わっていること。
- 3-11. ローカルマシンでのジョブ実行 (built-in ジョブスケジューラでの計算管理や、PBS および SLURM の利用) や、計算サーバーにジョブを投入 (SSH 接続にて Linux サーバー上で計算実行、PBS および SLURM によるジョブ管理) する機能を有すること。
- 3-12. 提供形態はダウンロード形式とし、併せてインストール用の電子記録媒体(DVD もしくは USB メモリ)を付属すること。
- 3-13. オペレーティングシステムとして Windows11 上で動作すること。
- 3-14. 永久ライセンス版であること。
- 3-15. ライセンス形態はノードロックであること。
- 3-16. 1 年間の保守サポートサービスを含むこと。
- 3-17. オンラインマニュアルが提供されていること。

4. 設置場所

大阪府大阪市城東区森之宮 1 丁目 6 番 50 号

地方独立行政法人大阪産業技術研究所 森之宮センター 305 号室

5. 納入期限

令和 8 年 3 月 31 日 (火)

6. 検査

検査項目は以下の通りとする。

- ・員数検査
- ・外観検査
- ・性能検査

7. その他

- 7-1. 日本国内にサービス拠点を有し、ソフトウェアの使用に対して疑義が生じた場合には、速やかに応じられる体制が整えられていること。
- 7-2. ソフトウェア納入後 1 年を無償保守サポート期間とし、ソフトウェアの使用方法や技術情報の提供、インストール、バージョンアップ対応等のサポートを無償にて提供すること。
- 7-3. ソフトウェア納入後 1 年経過後は前項の保守サポートを有償にて提供すること。
- 7-4. 本仕様書に定める以外の項目で疑義が生じた場合は、双方協議のうえに対応すること。

と。

以上