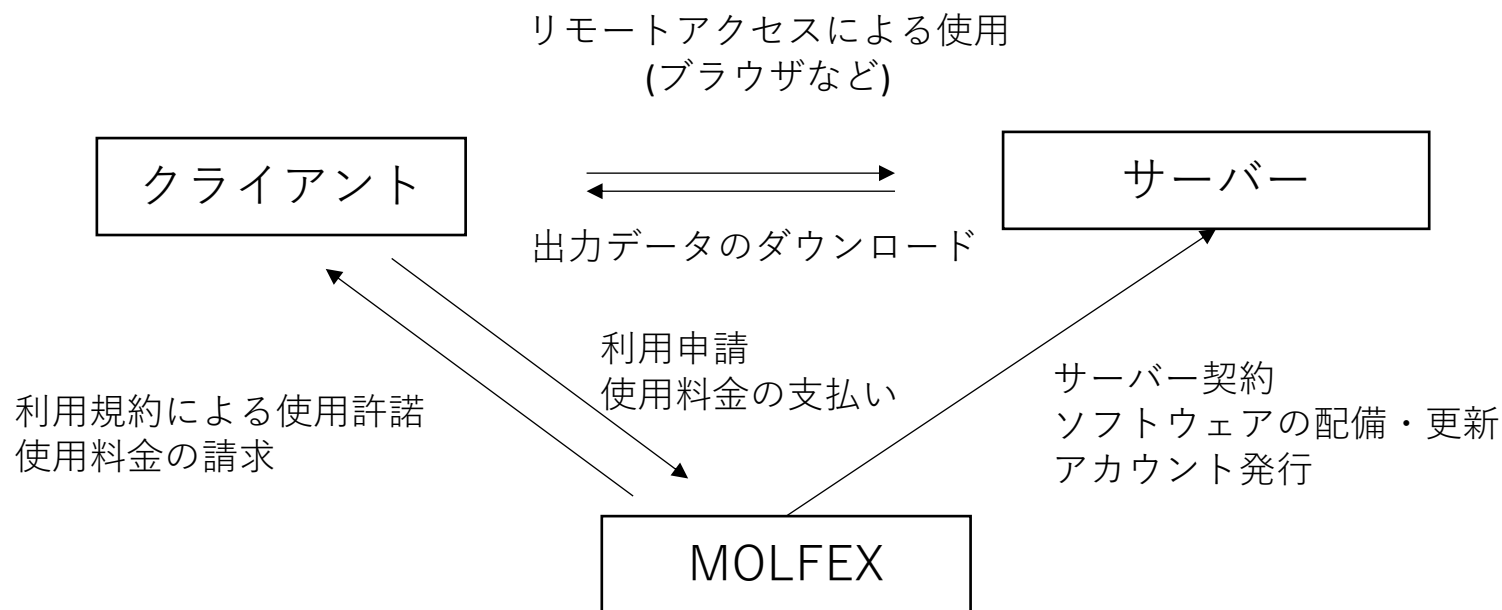

ソフトウェアご利用サービス

ソフトウェアmolflex™の開発

計算方法	機能	拡張機能・適用範囲など
VC	振電相互作用定数(VCC)の計算	原子振電相互作用定数(AVCC) 適用範囲: HF, KS, CIS, TD-HF, TD-KS
SOC	スピン軌道相互作用定数(SOCC)の計算	Wigner--Eckartの定理による換算
CUBE	空間分布関数のcubeファイルによる出力	<ul style="list-style-type: none"> ・振電相互作用密度(VCD) ・遷移双極子モーメント密度(TDMD) ・分子軌道(MO) ・差電子密度, 重なり密度(RHO)
RATE	輻射速度定数(蛍光・リン光) 無輻射速度定数(内部転換・系間交差)	促進モード・受容モード解析 Franck—Condon包絡線解析
SPECTRUM	蛍光スペクトル リン光スペクトル	線スペクトルとその帰属 色度座標表示
CONFORM	異なる二つの分子構造においてEckart条件※を満足するように回転	
OVERLAP	異なる分子構造間での波動関数の重なりを計算。断熱接続や構造最適化などで適用可能	適用範囲: HF, KS, CIS, TD-HF, TD-KS, CASCI, CASSCF, FCI

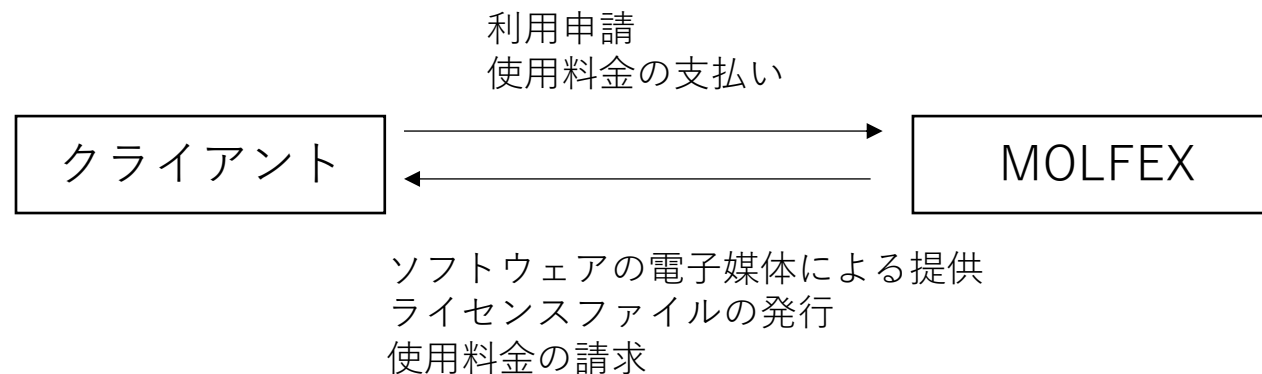
サービスA

- ・ 解析ソフトウェアをサーバーにインストールし、リモートアクセスにより使用
- ・ 主な対象は企業の開発者や大学研究機関の研究者など個人 (数万円/人・月)
- ・ 利用申請をし、**利用規約**に同意すればアカウントを発行。課金は月単位で発生
- ・ サーバーはサードパーティ (Google クラウド、大型計算機) を想定。
- ・ 著作権などの知的財産権はMOLFEXに帰属。



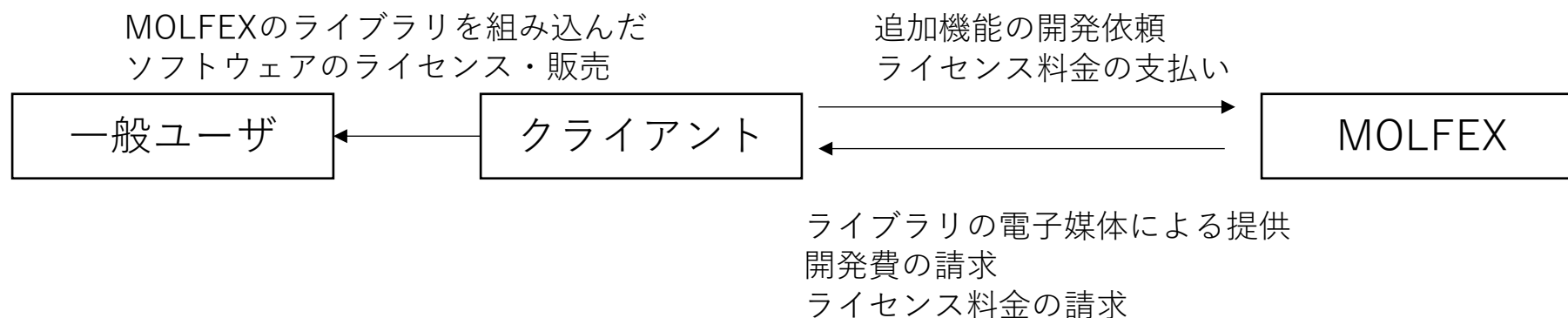
サービスB

- ・企業秘密のためサードパーティでの使用ができない組織を対象
- ・解析ソフトウェアを電子媒体等により提供。
- ・主な対象は企業の事業所や大学研究機関など法人
- ・使用許諾基本契約書/個別契約書に合意し、希望するソフトウェアを利用申請。MOLFEXが承認すればライセンスファイルを発行。ライセンス料は年単位(数百万円以上/年・ソフト)
- ・著作権などの知的財産権はMOLFEXに帰属。必要最低限の複製権やバグ等の翻案権は認める
- ・本ソフトウェアによって得られた結果の解釈や解析には高度な専門知識が必要であるため、年間契約としチュートリアルや技術相談を含めたサービス

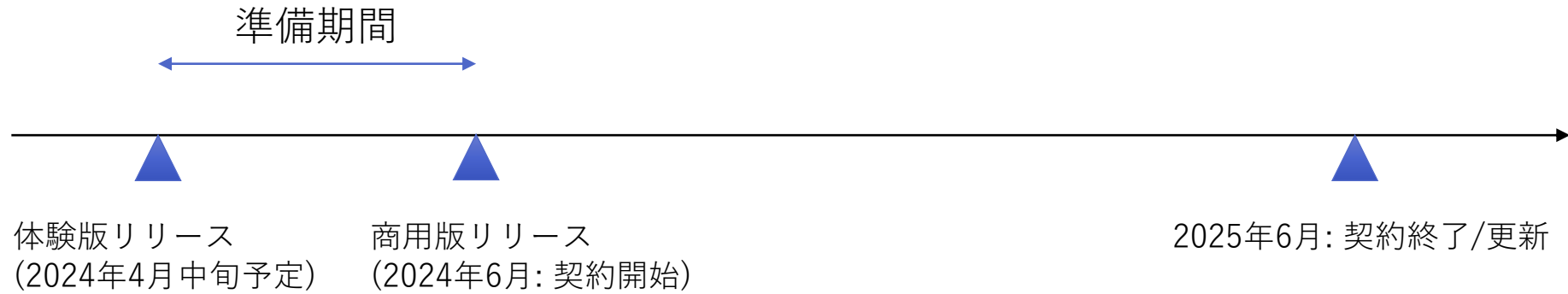


サービスC

- ・ AIやMIを開発しているスタートアップなどでMOLFEXのソフトウェア機能が必要な組織を対象
- ・ クライアントの要望に応じて機能を補完し、ライブラリをカスタマイズ。
- ・ 非独占的利用許諾・再許諾などは条件次第
- ・ MOLFEXが従前より保有する著作権はMOLFEXに留保。
- ・ 開発の成果物の権利の帰属は協議により決める
- ・ まずはサービスAもしくはBの利用から始めて欲しい



ソフトウェア（サービスB）公開の予定



商用版の公開までの間、体験版をご提供いたします。無償にはなるのですが、一つだけお願いがございます。

実際にご使用していただき、ご意見・ご感想・ご要望などを私たちに教えてください。

製品の改善につなげていきたいと思っております。