

S P E C I F I C A T I O N

| ITEM NO | DESCRIPTION | 수량 | 요구처 | 담당교수 |
|---------|---|----|-----|------|
| #1 | 분자모델링 시뮬레이션 S/W Maternal Studio 및 H/W workstation | 1 | | |
| | <p>A. Specification</p> <p style="text-align: center;">[BIOVIA Materials Studio Academic Research Suite]</p> <p>Materials Studio는 분자모델링 소프트웨어로서, 손쉬운 GUI 환경의 Visualizer를 기반으로 다양한 모듈이 내장되어 있으며, 보유 라이선스에 따라 하나의 프로그램에서 Quantum mechanics, Molecular mechanics, mesoscale simulation의 구현이 가능합니다.</p> <p style="text-align: center;">[730A-I Workstation]</p> <p>분자모델링 프로그램(Materials Studio) 권장 사양 충족 192GB의 RAM 장착으로 메모리 사용량이 많은 복잡한 시스템의 quantum mechanics 계산 가능 고사양의 GPU (GTX 1650 4GB)를 통해 복잡한 구조도 모델링하여 시각화 할 수 있음 GPU를 사용한 더 빠른 속도의 molecular dynamics 시뮬레이션이 가능함 장비에 대한 안정성을 보장하고 꾸준한 관리로 분자모델링 연구에 지속성을 유지시킬 수 있음</p> <p>B. Feature</p> <p style="text-align: center;">[BIOVIA Materials Studio Academic Research Suite]</p> <p>BIOVIA Materials Studio Base 패키지에는 Materials Studio에서 제공하는 모든 모듈들이 포함되어 있습니다. GUI환경의 Visualizer tool 탑재, 각종 builder 탑재되어 있습니다. 1D, 2D, 3D의 원자, 분자, 결정, 고분자 및 메조스케일 영역을 하나의 플랫폼에서 구동이 가능합니다. 계산 자동화 솔루션을 지원할 수 있습니다. DFT 이론에 기반한 양자역학 모듈로, 분자, 고체, 표면의 전자 구조와 에너지에 대해 시뮬레이션 할 수 있으며, 반응 에너지, 열화학적 특성, 광학 및 진동 스펙트럼의 특성 제공이 가능합니다. DFT plane-wave 기반 모듈로 고체 시스템에서의 격자 상수, 구조의 특성, band structure, 전하 밀도, 광학 특성 등을 예측할 수 있습니다. Semi-empirical tight binding method 적용이 가능합니다. Gaussian 프로그램에서 설정, 실행 및 분석할 수 있는 인터페이스를 제공합니다. Semi-empirical molecular orbital method 적용이 가능합니다. Molecular mechanics 기반으로 구조 최적화, 분자의 거동에 따른 potential energy, 분자역학, 급냉역학 및 어닐링 수행할 수 있습니다. 온도 감소에 따른 흡착-기질 시스템에서의 configurational space에 대해 Monte Carlo search를 수행하여 안정한 흡착 구조에 대해 시뮬레이션 가능 수학적 수식으로 나타내어 QSAR 예측 모델을 구축할 수 있습니다.</p> <p style="text-align: center;">[730A-I Workstation]</p> <p>본체 :</p> <p>Workstation™ 3rd Gen Intel® Xeon® Scalable processor support Intel® C-621A chipset /Dual Socket P+ (LGA-4189) 16 DIMM slots 3200MHz ECC DDR4 RDIMM, LRDIMM 2x 5.25" peripheral drive bays, 4x internal 3.5" SATA rotating drive bays Dual LAN with GbE from C621, 2 SuperDOM port(s) 5 PCI-E 4.0 x16, 1 PCI-E 4.0 x8, 2 NVMe M.2 slots 1 VGA, 6 USB 3.2 Gen1 (4 Rear, 2 Front), 2 USB 3.2 Gen2 (1 Rear, 1 Front type C), 7.1 HD Audio 1200W Power Supply, Platinum level efficiency CPU(2) : Intel® Xeon™ 6330 Processor (2GHz, 42MB, 28-Core) MEM(6) : 32GB REG.ECC DDR4 SDRAM SSD : 970 EVO Plus 500GB M.2 NVMe HDD : 4TB HDD SATA3 7200rpm GPU : Geforce GTX 1650 4GB OS : Windows 10 Pro</p> <p>C. 설치 및 훈련조건</p> <p>S/W 사용관련 Q&A 수시 무상 지원(방문/전화/e-mail) 장애 발생 시 무상지원(방문/원격) 장비수리 및 교체로 인한 새 라이선스 무상 발급 및 설치(방문/원격) 고객 요청 시 제품 관련된 매뉴얼 및 사용법, 기타 자료 제공 인실리코 내사 정기교육 무상 제공(1 site당 1명) 고객 요청 시 방문/내사 특별교육 무상 제공 유지보수 시간 : 평일(주말 및 공휴일 제외) 09:00~18:00 구매일로부터 1년 간 위 항목의 서비스가 지원되며, 이후 유지보수 계약이 필요함</p> | | | |
| Others | 1. 입찰품목은(주장비) 반드시 정품제품에 한함 (정품이 아닐경우 입찰보증금 회수하고 무효처리함) 2. 설치 및 교육 포함 3. workstation에는 반드시 Materials Studio S/W 프로그램 및 정식 라이선스가 설치 되어 있어야 함 4. 응용과학용 소프트웨어(4323260501)를 공급 물품으로 입찰참가 등록한 자 5. Warranty : 1년 | | | |