https://www.molsis.co.jp/

Scienomics社 日本総代理店
株式会社モルシス
〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀
Tel: 03-3553-8030 Fax: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp https://www.molsis.co.jp/

開発元 Scienomics社ホームページ(http://www.scienomics.com/)もあわせてご覧ください。

※記載の商品名は各社の商標または登録商標です。 ※本カタログの仕様は予告なく変更する場合があります。

2018.06

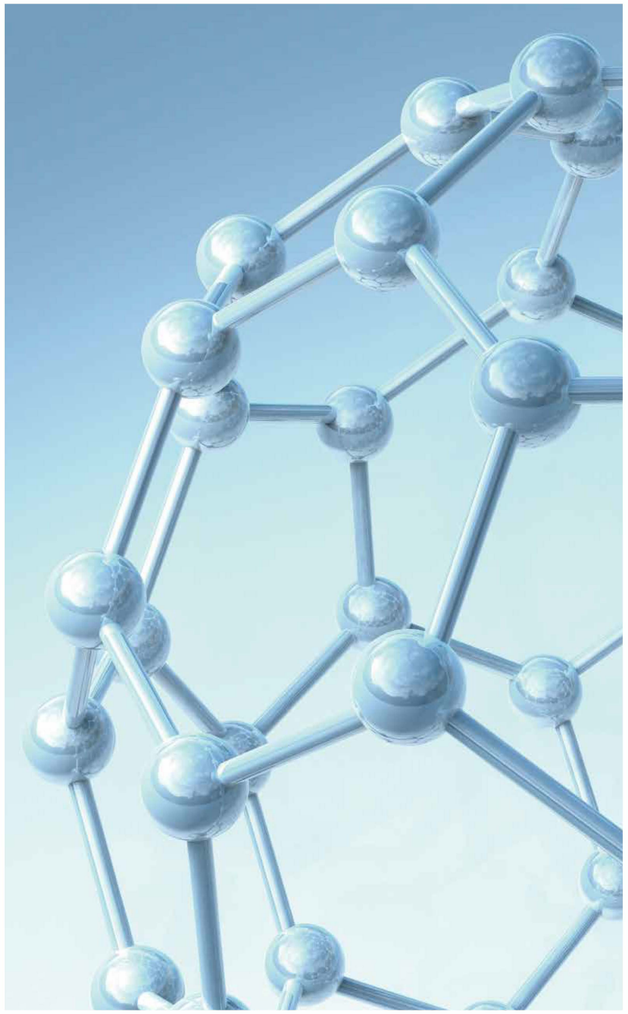
SCIENOMICS
delivering science

MOLSIS

SciMAPS

材料設計支援プラットフォーム

delivering science

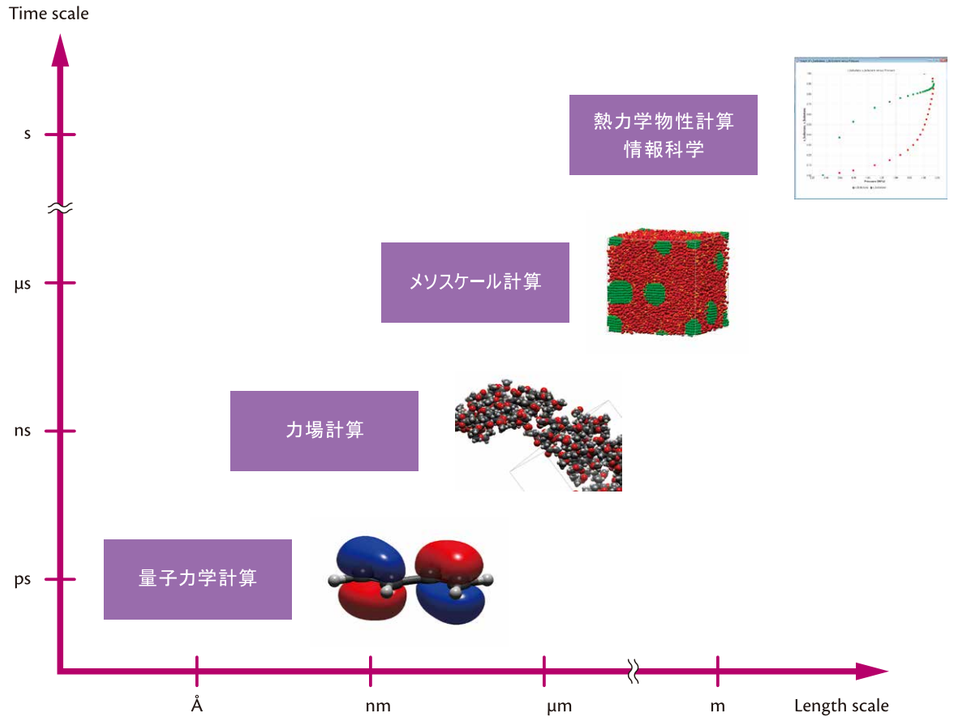


最適な材料設計をお手元に。

SciMAPS
Scienomics Materials And Processes Simulations

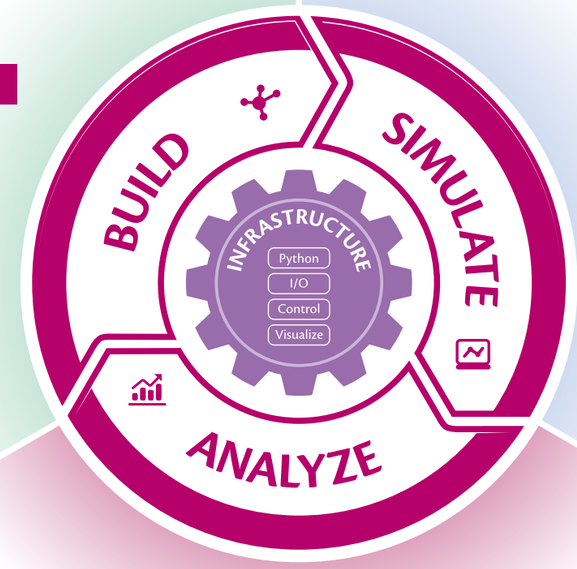
SciMAPSが提供する材料設計支援プラットフォーム

SciMAPS(Scienomics Materials And Processes Simulations)は、外部プログラムとの連携を前提とした、拡張性の高い設計思想を持つ材料設計支援プラットフォームです。
SciMAPSは量子化学計算からメソスケール計算まで、時間的にも空間的にも異なる様々なスケールの計算科学手法に対応しています。SciMAPSには、使いやすいモデル構築機能、データ解析機能が標準装備され、大学や研究機関で開発された世界的に定評のある先進の計算プログラムを統一された操作で利用できます。
SciMAPSが提供するプラットフォーム上では、高分子の物性の推算をはじめ、低分子や高分子の凝集状態や挙動の解析、分子反応の解析、固体・表面・界面の電子状態の解析等、様々な解析が行えます。



SciMAPSの計算手法とシミュレーションスケール

SciMAPSの各機能は、様々なシミュレーションに対して分子モデルを構築する構造構築機能(Build)、開発元オリジナルの計算プログラムとそれに対するインターフェースから構成されるプラグインとして提供されるシミュレーション機能(Simulate)、シミュレーション機能により得られたデータを解析する解析機能(Analyze)、実行したジョブの管理、構造データの入出力、スクリプトを実行など、SciMAPSの根幹となるインフラストラクチャ(Infrastructure)からなります。基本構造構築機能、解析機能、インフラストラクチャ機能からなる基本環境(赤字)に必要に応じて各プラグインを追加することにより研究に最適な材料設計環境をそろえることができます。



構造構築機能

- 基本構造構築
- 複合構造構築
- 特定構造構築

シミュレーション機能

- 力場計算
- 量子力学計算
- メソスケール計算
- 熱力学物性計算
- 情報科学

データ解析機能

- 基本解析ツール
- 特定物性ツール

インフラストラクチャ機能

- Python
- ジョブ管理
- 入出力機能
- 可視化

BUILD

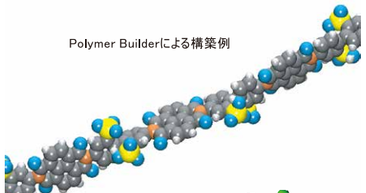
構造構築機能

～ユーザの発想を様々な構築機能でモデル化～

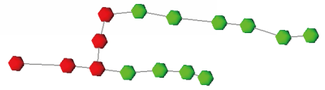
分子シミュレーションを行うには研究対象となる分子系のモデル化の成否が重要です。近年、シミュレーションの高速化に伴い、より現実系に近いモデル構築が必要になってきています。SciMAPSの構造構築機能は、基本構造構築機能、基本構造を複数組み合わせた複合構造構築機能、架橋構造やカーボンナノチューブを構築する特定構造構築機能の3つからなります。これらの機能を組み合わせることによって、研究対象にマッチした分子モデルを構築します。

基本構造構築

- Sketcher
  3Dスケッチおよび分子フラグメントによる分子構築。
- Polymer Builder
  重合度と繰り返し単位を指定することでホモ、ブロック、ランダムコポリマーを構築。タクチシチーの指定も可能。
- Crystal Builder
  空間群と部分座標を指定することで結晶構造を構築。
- Surface Builder
  構築した結晶構造を元にミラー面を指定することで表面構造を作成。
- Mesoscale Builder
  分子を構成するビーズとそのトポロジを3次元スケッチャで構築。



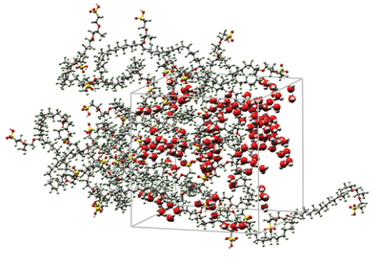
Polymer Builderによる構築例



Mesoscale Builderによる3次元スケッチャの例

複合構造構築

- Interface Builder
  2つの結晶構造から界面のモデルを構築。
- Surface Docker
  表面モデル上でエネルギー的に安定な分子配座を探索しモデルを作成。
- Amorphous Builder
  National Technical University of AthensのDoros Theodorou教授とScienomics社の共同開発によるアルゴリズムCBMC(Configurational Bias Monte Carlo)法を採用した非晶構造構築プログラム。複雑な分子鎖に対しても、現実に近い密度で自然なモデルを構築することが可能。



高分子電解質膜−水系のアモルファス構造構築例

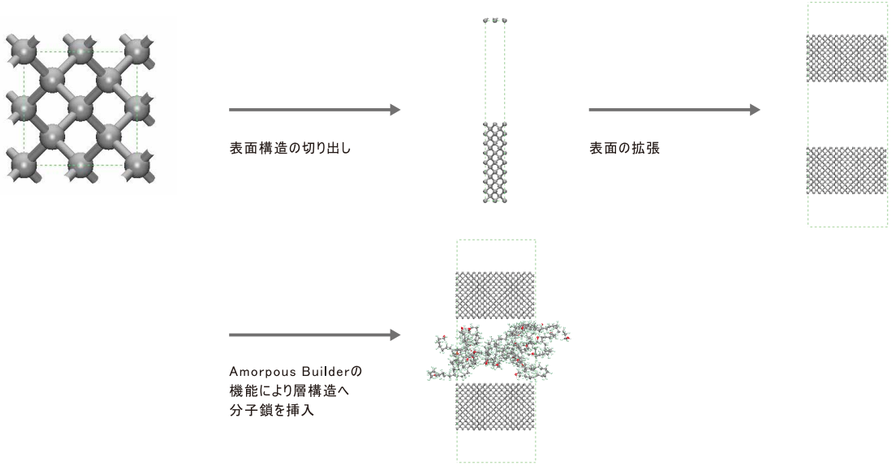
特定構造構築

- Cross-Link Builder
  LiとStrachanらにより提案された多段階結合生成アプローチ [1]と分子動力学計算を組み合わせた架橋構造構築プログラム。モノマーのみで構成されるアモルファス初期構造から、分子動力学計算を行いながら反応点が近づくと結合を生成させ、架橋構造を作成。
- Carbon Nanotube Builder
  ナノチューブの構造を構築。キラリティ指定、直径の指定、3次元周期境界モデルにも対応。

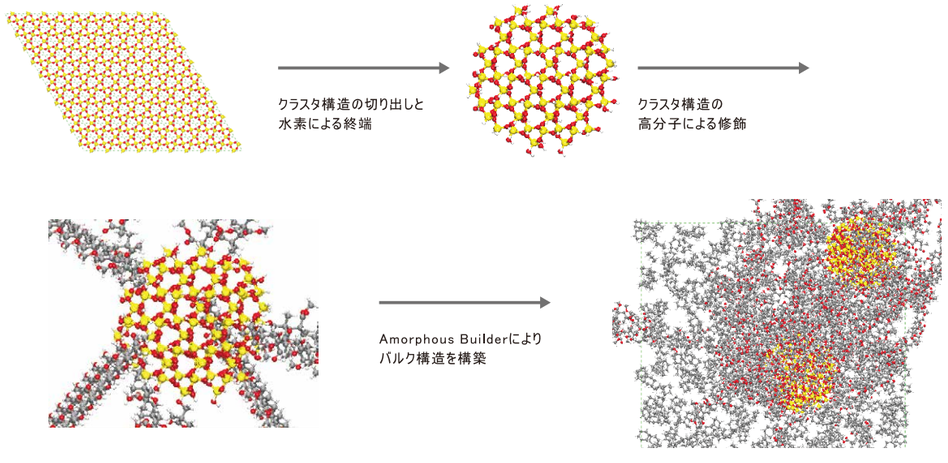
1) C. Li, A. Strachan, *Polymer*, 51, 6058-6070 (2010)

複合構造構築例

例 1　界面構造の構築



例 2　分子鎖のグラフトしたナノ粒子のバルクモデル



SIMULATE

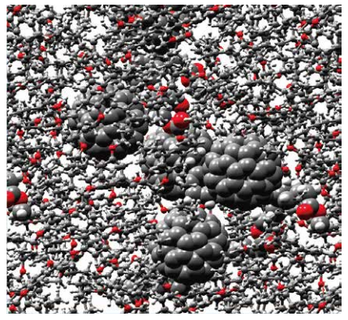
シミュレーション機能　～先進のプログラム群をサポート～

様々なスケールの計算手法に対応したプラグインを提供します。力場計算、量子力学計算、メソスケール計算に加え、構造活性・物性相関や状態方程式による物性予測に対応しています。それぞれの計算分野で定評のある先進のシミュレーションプログラムに対応しています。

力場計算

分子動力学計算プログラム

系を構成する分子モデルの各原子に対して初速度を与え、ニュートンの運動方程式にしたがって系の時間発展を計算します。得られた構造変化の履歴から分子の挙動を解析します。一般的なコンピュータで数万原子まで取り扱うことが可能ですので、低分子から高分子、液体、固体、界面等の様々な系の原子レベルでの挙動の研究に利用可能です。拡散定数など時間の発展を考慮する必要がある場合に利用します。SciMAPSのサポートするプログラムは、並列化による高速化、遠距離相互作用の高速計算等、最新の手法を多数取り揃えています。



LAMMPSによる凝集状態の分子動力学シミュレーション

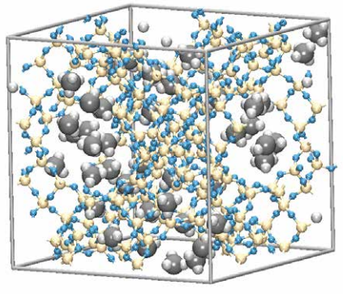
■ 主な機能

- ○ 極小化計算
- ○ NVE、NVT、NPTの各種アンサンブル
- ○ VDW相互作用計算　カットオフ法
- ○ クーロン相互作用計算　カットオフ法、PPPM法、PME法、Ewald法
- ○ マルチタイムスケール数値積分法（rRESPA法）
- ○ DREIDING、CFF、AMBER、CHARMMの各力場に対応

▸ **LAMMPS-Atomistic Plug-in**　▸ **NAMD Plug-in**

モンテカルロ計算プログラム

モンテカルロ法は、確率的手法を用いて系の状態を出現させることで、系を構成する粒子の分布を求める方法です。分子動力学計算のように時間の概念を考慮できませんが、分子動力学計算では取り扱うことの難しい液液、気液平衡などの相平衡状態やゼオライトへの吸着現象の研究に最適なプログラムです。また、SciMAPSがサポートするプログラムは、効率の良いコンフォメーションを発生する多数のアルゴリズムを用意し、さまざまな力場関数系に対応しています。



Towheeによるゼオライト中のメタン分子の吸着シミュレーション

■ 主な機能

- ○ NVE、NVT、NPT、μVT、ギブスの各種アンサンブルに対応
- ○ CBMC法による効率の良いサンプリング手法を搭載
- ○ AMBER、CHARMM、DREIDINGの各力場に対応

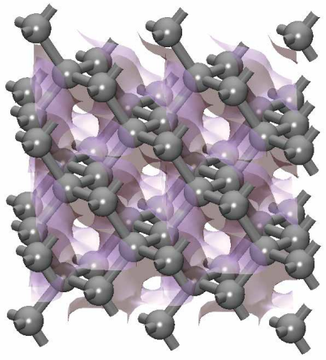
▸ **Chameleon Plug-in**　▸ **Towhee Plug-in**

量子力学計算

第一原理バンド計算プログラム

周期境界条件下での量子力学計算プログラムです。時間依存DFT法やGW法、PAW法等、密度汎関数法のさまざまな技術により、金属、セラミックス、半導体等の固体の構造、電子状態、物性の予測に最適です。

▸ **Quantum Espresso Plug-in**　▸ **ABINIT Plug-in**　▸ **VASP Interface**



ABINITによる電子密度図

量子化学計算プログラム

非周期境界条件下での量子力学計算プログラムです。HF、MP2、DFT、時間依存DFT、CC法等、さまざまな手法を搭載しており、分子の構造や反応機構の予測に最適です。

▸ **NWCHEM Plug-in**　▸ **TURBOMOLE Interface**

半経験的分子軌道法計算プログラム

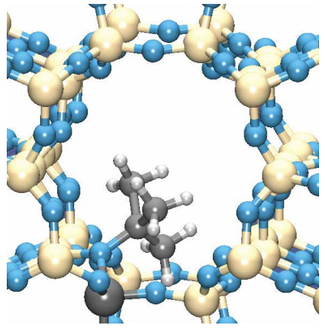
NDDO近似に基づき、実験値を再現するように決められた経験的なパラメータを用いることによって、計算コストをかけずに精度の高い計算を可能にしたプログラムです。非経験的分子軌道法では扱うことのできない大きな分子に対しても非常に高速に計算でき、低分子から数百原子程度の比較的大きな分子までの分子構造や物性の予測に適しています。

▸ **MOPAC Interface**　▸ **MNDO Plug-in**

QM/MM計算プログラム

量子力学計算プログラムと力場計算プログラムを組み合わせた計算を行うことができます。量子化学計算プログラムと力場計算プログラムを組み合わせたQM/MM計算のみならず、量子化学計算と第一原理バンド計算を組み合わせたQM/QM計算も可能です。

▸ **QmPot Plug-in**



QmPotによる触媒反応の構造

遷移状態探索プログラム

量子化学計算で得られるエネルギー表面上の遷移状態を探索するツールです。各量子力学計算プログラムで計算されたエネルギーおよびその一次微分の情報を使って、LST(Linear Synchronous Transit)法、QST(Quadratic Synchronous Transit)法およびNEB(Nudged Elastic Band)法が利用できます。

▸ **TRANSITION STATE LOCATOR**

SIMULATE

メソスケール計算

散逸粒子動力学計算プログラム

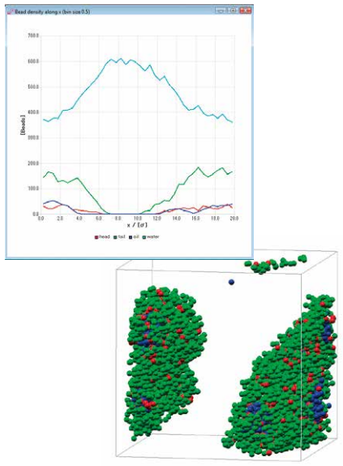
複数の原子、分子を1つの粗視化粒子として表現し、ソフトマターをシミュレーションするプログラムです。液体や高分子の相変化など、分子動力学計算では対応の難しいメソスケールのシミュレーションを可能にします。

▸ **LAMMPS-DPD Plug-in**

フラグメント間相互作用計算プログラム

フラグメント間相互作用計算プログラムはMolecular Silverware法による二元混合物の相互作用を計算します。高分子や液体の熱力学物性や散逸粒子動力学計算の相互作用パラメータの推算に利用します。

▸ **FHMixinig Plug-in**



LAMMPS-DPDによるミセル生成のシミュレーション

熱力学物性計算

熱力学物性推算プログラム

状態方程式の統計会合流体理論Statistical Associating Fluid Theory(SAFT) [1)]およびその派生であるPC-SAFT [2)]、ePC-SAFT [3)]を利用して、ポリマー、コポリマー、電解質等からなる混合物の物性値および相平衡を推算することができます。

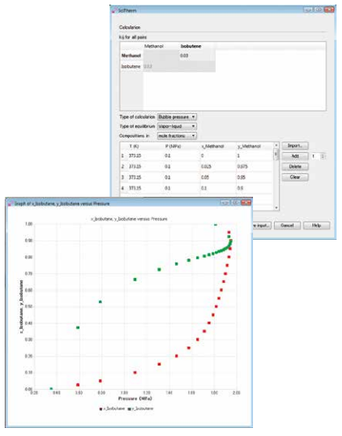
▸ **SciTherm**

1) S. H. Huang, M. Radosz, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 29, 2284-2294 (1990)
2) J. Gross, G. Sadowski, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40, 1244-1260 (2001)
3) C. Held, L. F. Cameretti, G. Sadowski, *Fluid Phase Equilib.*, 270, 87-96 (2008)

薬物溶解度推算プログラム

PC-SAFT法により複数の純溶媒もしくは混合溶媒に対する薬品の溶解度を計算するためのインターフェースです。

▸ **SciPharma**



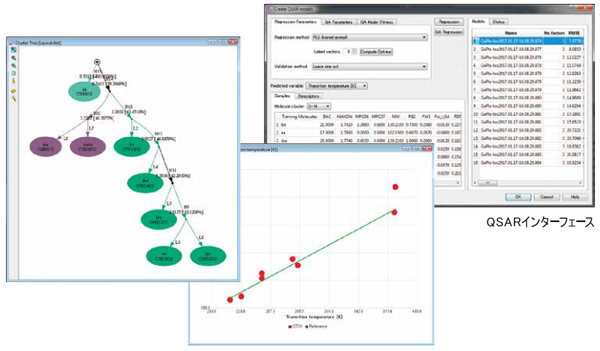
SciThermインターフェース

情報科学

構造活性相関プログラム

様々な物理化学的情報（記述子）と実験値（活性値）との間の相関モデルを構築することのできるツールです。複数の記述子の特徴を持つ主成分軸を用いたPLS回帰分析や記述子を自動的に取捨選択する遺伝的アルゴリズムを利用することで、相関モデルを構築することができます。構築した相関モデルにより新規の分子系に対する実験値の予測を行うことを可能にします。

▸ **QSAR Plug-in** ▸ **DRAGON X**

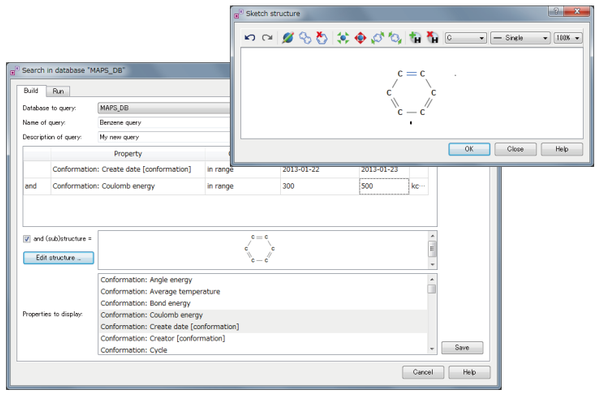


QSARインターフェース

計算データ管理プログラム

ユーザが作成した計算データを、ネットワーク上のデータベースに保存、管理するためのツールです。グループ内の他のユーザにデータを公開することで、過去の計算の有効利用を可能にします。検索するためのツールとしてQuery Builderが搭載され、2次元スケッチによる分子構造指定ならびに計算設定・計算結果等の範囲指定を簡単に行うことができ、データベース中を詳細に検索することができます。

▸ **Database**



2次元スケッチとQuery Builder

ANALYZE

データ解析機能

～シミュレーションデータを共通のツールで解析～

SciMAPSは、シミュレーションプログラムによらずスケールや手法に応じた共通のデータ形式でシミュレーションデータを読み込みます。共通形式のデータは解析ツールにより可視化されます。物性解析をする上でシミュレーションプログラムと連携して計算を行うことがあります。このような物性解析は、特定物性解析ツールとして提供されます。

基本解析ツール

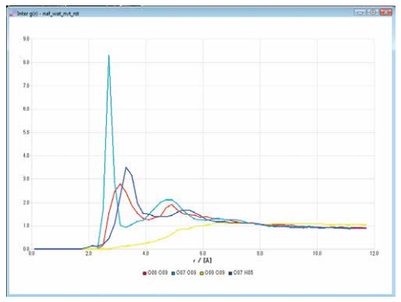
TRAJECTORY ANALYSIS

■ 分子シミュレーション解析機能

- ○ 分子シミュレーションの計算結果のアニメーション表示
- ○ 動径分布関数の計算
- ○ 任意の組み合わせのデータに対する相関関数
- ○ 構造（結合距離、結合角、二面角、面外角）やエネルギーの時間変化およびその頻度分布のグラフ化
- ○ 平均二乗変位と自動フィッティングによる拡散定数の計算
- ○ 自由体積計算およびその表示

■ 電子状態解析機能

- ○ 軌道準位、バンド構造図および状態密度図の表示
- ○ 分子軌道の等値面表示
- ○ NMRスペクトルの表示
- ○ 基準振動解析のアニメーションと矢印による振動モードのベクトル表示
- ○ 振動スペクトル表示



原子タイプ別に表示した動径分布関数

MAPS INSPECTOR

SciMAPS上に読み込まれた分子や原子の情報のリスト表示や情報を基に特定の分子や原子の選択を行うことのできるツールです。

POROSITY ANALYSIS

ゼオライトやアモルファス構造中の空隙を解析することのできるツールです。空隙間を通ることのできる最大の球の直径や空隙内に入る最大の球の直径の解析、系内にある空隙の大きさの分布のグラフ化することができます。

特定物性解析ツール

ReaxFF Analysis

結合の生成、開裂を取り扱えるよう設計された力場ReaxFF [1]とLAMMPSを利用して得られた計算結果を解析するプログラムです。ReaxFF Analysisはシミュレーション中に生成、分解する分子種を解析し、その分子種の数の経時変化をグラフ化します。また、どのような反応が何回シミュレーション中に起こったかを表に表示して、反応中間体や反応経路に対する知見を得ることができます。

1) A.C.T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, W.A. Goddard III, *J. Phys. Chem. A*, 105, 9396-9406 (2001).

Elastic Properties

Elastic propertiesは高分子、固体などに対して弾性（ヤング率や特性比など）を計算するためのプログラムです。サンプリングのためのLAMMPS計算の入力作成からその出力解析まで行うことができます。

INFRASTRUCTURE

インフラストラクチャ機能

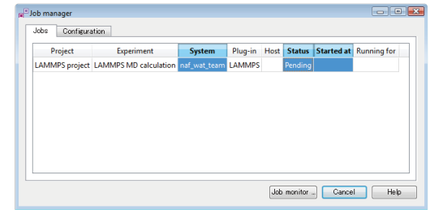
～根幹を支える機能～

様々な入出力ファイルのサポート

SciMAPS上の構造情報はPythonスクリプトを経由してユーザの指定した形でファイルに出力することができますので、SciMAPS上で構築した構造を他のシミュレーションプログラムの入力として利用できます。また、シミュレーションの出力結果もスクリプトを経由してSciMAPS上に読み込める様になっていますので、SciMAPSがサポートしているシミュレーションプログラムと同様に履歴ファイルの解析が可能です。

ジョブマネージャ

ジョブの実行、実行状況のモニタリング、強制終了を行うことができます（リモートジョブを含む）。特殊な条件設定に対応できるよう入力ファイルの編集・実行機能も搭載しています。リモート設定のチェック機能などリモートジョブを実行するのに便利な機能も搭載しています。



ジョブ管理インターフェース

Pythonスクリプト

SciMAPSでは、ほとんどのGUI機能をPythonスクリプトで実行することができます。これらのGUI機能を組み合わせて自動実行できるよう、SciMAPSにはPythonスクリプトを編集し実行するためのスクリプト編集・実行機能を搭載しています。この機能を利用すると、同一の設定で多数の計算を実行したり、異なる計算手法を組み合わせた計算手順を自動実行するなど、GUIでは煩雑になる作業を大幅に効率化することができます。

サポートプラットフォーム

SciMAPS関連製品は次の環境でご利用いただけます。詳細はお問い合わせください。

■ Windows　■ Red Hat Linux　■ Novell Suse Enterprise Linux Server

お問い合わせ窓口

株式会社モルシス

■ Tel : 03-3553-8030　■ E-mail : sales@molsis.co.jp　■ URL : https://www.molsis.co.jp/