

Materials and Processes Simulations 販売開始

弊社は6月1日、フランスのScienomics社と代理店契約を締結し、材料設計支援プラットフォーム Materials and Processes Simulationsの国内販売を開始いたしました。本製品は、量子化学計算から分子力学・動力学計算まで、さまざまな計算化学手法に対応した材料設計支援プラットフォームです。その適用分野は、高分子の物性推算をはじめ、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、多岐にわたります。

製品構成

本製品は、Windows、Linux (Red Hat, Fedora Core)の各OSに対応しており、入力データの準備、ジョブ管理から計算結果の解析まで、計算プログラムの種類にかかわらず、同じ操作環境を提供します。計算プログラムとしては、NAMD、LAMMPSなど学会で定評のある種々のプログラムに対してインターフェースが用意されております。また、APIによりユーザが機能を拡張することも可能です。さらに、スクリプト言語としてPythonを採用しており、異なるプログラム間の連携など、柔軟な利用を可能にしています。

モデル構築機能

本製品は、単分子から周期境界条件モデルまで、さまざまなモデルを構築することができます。特に、バルク状態の高分子モデル構築は、National Technical University of AthensのDoros Theodorou教授とScienomics社の共同開発による最新のアルゴリズムCBMC (Configurational Bias Monte Carlo) 法を採用しており、短時間でモデルを得ることができます。高分子のバルクモデルを構築する場合、一般的なメトロポリスモンテカルロ法では、不自然なカテナン構造（環構造を分子鎖が突き抜けるような構造）が発生しやすく、希薄なモデルを構築した後圧縮するなどの操作を必要としていましたが、CBMC法は、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できます。

データ解析機能

量子化学・量子物理計算、および分子力学・動力学計算から出力されるデータに対して、主に以下のような解析を行うことができます。

- ◆分子構造解析機能
 - ・分子構造比較機能
- ◆電子状態解析機能
 - ・軌道準位表示
 - ・分子軌道の等値面表示
 - ・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
 - ・状態密度図
 - ・バンド構造図
- ◆分子力学・動力学解析機能
 - ・分子力学・動力学計算結果のアニメーションおよびエネルギーの時間変化
 - ・双極子モーメントの時間変化
 - ・任意の構造パラメータの時間変化
 - ・平均二乗変位と自動フィッティングによる拡散定数の解析
 - ・動径分布関数
 - ・任意の組み合わせのデータの相関関数等々

対応する計算プログラム

本製品は下記の5つの計算プログラムに対応しています。

- ・第一原理バンド計算 ABINIT
- ・半経験的分子軌道法 MNDO
- ・分子力学・動力学計算 LAMMPS
- ・分子力学・動力学計算 NAMD
- ・非経験的分子軌道法 Turbomole

詳細に関しては、以下のURLをご参照ください。

<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/scienomics/index.html>