

SciMAPS –バージョンアップ情報–

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た材料設計プラットフォームです。SciMAPSの最新版であるバージョン3.2が7月にリリースされます。バージョン3.2では、分子構築機能を中心に、QSAR機能、計算結果を保存するためのデータベース機能の追加等がなされました。本稿では、その改良および新機能について紹介します。

Amorphous Builderの新機能

Amorphous Builderでは以下のような機能が追加されました。

- リコイルグロス法による構造構築機能
- 非等方セルに対するアモルファス構造構築機能の追加
- 指定されたZ軸方向の領域にアモルファス構造を構築する機能の追加
- 指定した原子の近傍から分子鎖を配置する機能の追加

これらの機能を組み合わせることにより高分子-高分子、低分子-高分子、結晶-高分子等の様々な界面のモデルを構築することが可能になりました。また、複数の層からなるモデルの構築も可能となりました。構造発生にリコイルグロス法を採用することで今まで構築の難しかった系に対しても容易にアモルファス構造を構築できるようになりました。

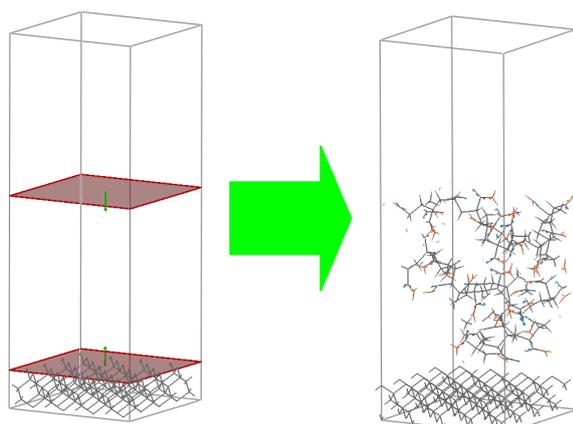


図 1 Amorphous Builderによる分子層の構築
構築範囲を指定して(左)、高分子を構築(右)。
これを繰り返して分子層のモデルを構築する。

Nanotube Builder

様々な形状のナノチューブを構築可能とするNanotube Builderが利用可能となりました。カイラル指数(m,n)を定義することで様々なスタイルのナノチューブ構造を簡単に構築可能です。

Surface Builder

Surface Builderで分子構築時に構築される表面の指定や真空層が表示されるようになりました。具体的に出来上がる系の大きさが把握できるようになり、より分かりやすくなりました。

Database Plug-in

Database Plug-inはユーザーが作成したプロジェクトを、ネットワーク上のデータベース上に保存、検索、読み込みを行うツールです。またグループ内の他のユーザーへのデータの公開も可能なため、過去の計算の共有や有効利用に役立ちます。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や計算設定、計算結果等の範囲指定を簡単に行うことができ、詳細に検索することができます。

QSAR Plug-in

SciMAPS上で得られる様々な情報や実験値(活性値)から相関モデルを構築することのできるツールです。実験値(活性値)と計算科学的手法によって得られる記述子からPLS回帰分析や記述子を自動的に選択する遺伝的アルゴリズムを利用して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。記述子計算には32,000の記述子を提供するDRAGON-Xを利用します。

お問い合わせ

新規製品であるNanotube Builder、Database Plug-in、QSAR Plug-inについては有償でのご提供になります。価格等詳細に関してはお問い合わせください。