

材料設計支援プラットフォーム

# SciMAPS製品情報

SCIENOMICS  
delivering science

6月3日に東京にて、SciMAPSの開発元であるScienomics社よりDr. Xenophon Krokidisを招聘し、セミナーを開催しました。セミナーでは、さまざまなスケールにおける実用物性推算の応用事例とSciMAPSの開発ロードマップについて紹介しました。またこれに合わせて学位授与機関向けの新パッケージや導入の際によりお求めやすい新たなタイプの年間ライセンスを販売することを決定しました。本稿では、この2つのトピックスについて報告します。

## ■SciMAPSセミナー報告

量子化学・物理からメソスケール、QSPRまで、さまざまなスケールの手法を利用した実用的な6つの事例を紹介しました。

異なる手法を1つの環境で利用できるSciMAPSの特長を活かし、複雑な系やプロセスに対し、複数の手法を有効に利用した事例を紹介しました。

応用事例は以下のとおりです。

- 1) LAMMPS-Atomistic、LAMMPS-DPDによるナノコンポジットPOSSを含んだ高分子の物性推算
- 2) TowheeとSciThermによる冷媒分子の平衡挙動計算
- 3) TowheeとNWChemによる炭化水素の触媒分解反応の解析
- 4) ABINITによる半導体材料の材料設計
- 5) 臨界ミセル濃度予測のためのQSPR解析
- 6) MNDOを基にしたQSPR解析による吸収波長推算

SciMAPSのロードマップでは今後の開発スケジュールを紹介しました。特に、この秋に予定されているメジャーバージョンアップ(SciMAPS 4.0)では、全面的にGUIを見直し、10万原子以上の表示が可能なグラフィックスの改善、QtChartをベースとしたスペクトルのグラフ表示のクオリティの向上、解析機能の追加が計画されており、より充実した機能を提供していきます。

## ■新パッケージおよび特別年間ライセンス

### ■アカデミック向け新パッケージSciMAPS Basic

学位授与機関向け新パッケージSciMAPS Basicの販売を開始します。SciMAPS Basicは、SciMAPSの定評のある分子モデリング機能とシミュレーションプログラムに対す

る解析機能に半経験的分子軌道法MNDOを加えたパッケージで、シミュレーションのプリ、ポスト処理プログラムをお探しの方に最適です。

SciMAPS上の構造情報はスクリプト機能を経由してユーザー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、構築した構造をお手持ち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上に読み込めるよう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。

SciMAPS BasicにはGUI上から計算設定をして入力作成・計算実行する機能はありませんが、シミュレーションプログラムに対応したプラグインを別途ご購入いただければ、GUIによる入力作成が可能となります。

### ■年間ライセンス25、50

新たなタイプの年間ライセンス50と25を導入いたします。

年間ライセンス50は永久ライセンスの50%を3年間お支払いいただければ、永久ライセンスに転換することのできるライセンスです。年間ライセンス25は、永久ライセンスの25%の価格を1年目、その後3年間永久ライセンスの50%をお支払いいただくことで永久ライセンスに転換が可能なライセンスです。年間ライセンス50、25のいずれも、永久ライセンスへの転換後は、通常の永久ライセンス同様、保守費用をお支払いいただくことで、バージョンアップやサポートを受けることができます。

本ライセンスは、初期導入費用を抑えており、また永久ライセンスへ転換ができますので、永久ライセンスのご導入をより容易にするものです。

- ・弊社Webサイトには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。
- ・電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバーは下記URLをご利用ください。
- ・<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/news/newsletter.html>
- ・本ニュースレターは、弊社取り扱い製品をご購入いただきましたサイトのご担当者様にお送りしています。その他に発送をご希望がございましたら弊社までご連絡ください。
- ・記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

RSI ニュースレター

Vol. 22, No. 3, 2015

2015年7月1日発行

発行人 後藤 純一

発行所 株式会社菱化システム

Copyright © 2015 Ryoka Systems Inc.

Ryoka  
Systems  
Inc.株式会社 菱化システム  
科学技術システム事業部URL: <http://www.rsi.co.jp/>TEL: 03-6830-9724 FAX: 03-5610-1161 E-mail: [support@rsi.co.jp](mailto:support@rsi.co.jp)