

材料設計支援プラットフォーム

SciMAPS 4.0リリース情報

SciMAPS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。本稿では、7月下旬にリリースされました最新版の4.0の概要について紹介します。

■新たに追加されたプラグイン

SciMAPSの各計算プログラムは、計算プログラム本体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ます。基本環境であるPlatformに各プラグインを追加することにより研究に最適な環境を取り揃えることができます。

本バージョンでは半経験的分子軌道法のMOPAC Plug-in、第一原理バンド計算のQuantumEspresso Plug-in、モンテカルロ法のChameleon Plug-inの3つのプラグインが追加されました。Chameleon Plug-inでは、全原子モデルおよびUnited Atomモデルのサポートに加え、End Bridging法やConfigurational Bias法など、高分子の熔融体のシミュレーションに適したさまざまな手法が搭載されています。MOPAC Plug-inについては、弊社で取り扱っている最新のMOPAC2016の入力作成および計算結果の解析を行うことが可能です。

■表面上の安定構造探索機能

表面上でエネルギー的に安定な分子配座を探索するツールとしてSurface Docker機能が追加されました。表面に平行な面上にグリッド点を設け、各グリッド点上で分子を回転させ、エネルギー計算をすることで、各点での安定な分子配置を得ます(図1)。得られた結果はエネルギーの低い順に並べられ、どのような分子配置が安定かを調べることができます。シミュレーションの初期構造発生ツール、表面上の分子の安定構造探索のツールとして利用することができます。

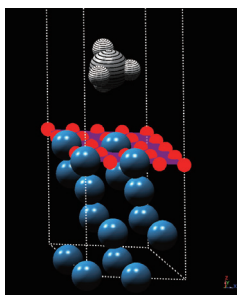


図1 Surface Dockerによるドッキング面(紫)とグリッド点(赤)の表示

■解析機能の強化

解析機能としては、グラフ機能が強化され、データ解析ツールMAPS Inspectorおよび空隙解析ツールのPorosityが利用できるようになりました。

グラフ機能の強化については、出力されたグラフウィンドウに対して、表示範囲や補助マークの位置の変更、タイ

トルの追加等グラフ表示に関する定義をユーザーが自由に行えるようになりました。

MAPS InspectorはSciMAPS上に読み込まれた分子や原子の情報をリストとして表示したり、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。SciMAPSのトラジェクトリ解析には選択した原子に対してのみ行う機能がありますので、この機能と組み合わせることで、特定の分子の指定した原子に対して解析が可能となります。また、リスト化された情報はクリップボードにコピーすることができますので、多数の分子の情報を一括して表計算ソフトにコピーして利用することも可能です。

Porosityは、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(図2)。Porosityはローレンス・バークレー国立研究所で開発されたZeo++¹⁾を利用して解析を行っています。

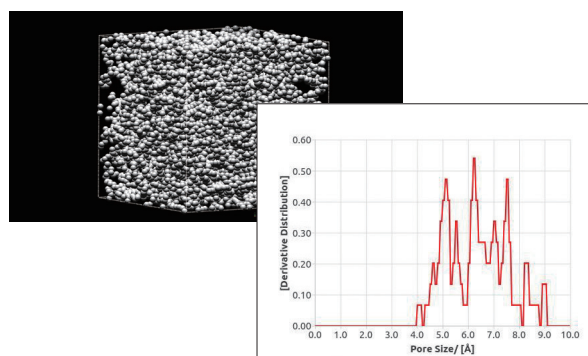


図2 Porosityによるアモルファルカーボンの空隙分布解析

■刷新された描画機能

分子表示に関するモジュールを再度構築したことで、より精細でより多彩な分子表示が可能になり、ユーザの目的に合った表示が可能になりました。

主な改良・追加機能は以下の通りです。

- 1) 20万原子以上の表示
- 2) ポリヘドラ表示
- 3) ユーザ指定による光源の方向の変更
- 4) 化学種毎、分子鎖毎の色分け

1) <http://www.maciejharanczyk.info/Zeopp/about.html>