

Winmostar Cloudのための対称操作モジュールの開発

○長代新治¹、千田範夫¹、古賀良太¹、北條博彦²

¹株式会社クロスアビリティ(〒113-0033 東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル301)

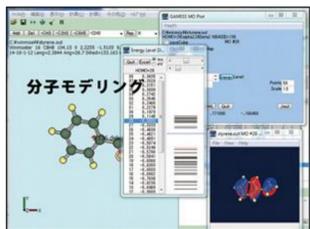
²東京大学生産技術研究所(〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1)

緒言

対称操作モジュールの機能

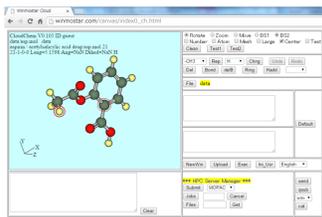
○Winmostar™とは？

- ・分子モデリングアプリケーション
- ・独自の2Dレンダリングにより、高速な操作が可能
- ・Gaussian, GAMESS, MOPAC等のプリポスト



○Winmostar Cloudとは？

- ・上記Winmostarのweb版
- ・クロスプラットフォーム対応
- ・x-ability社で現在開発中 (バンド計算ソフトのプリポスト機能などの拡張)



機能1. 結晶系の描画

・結晶格子の周期境界条件を用いるバンド計算のインプットファイルには230個の空間群に分類される対称操作が必要である。

対称操作モジュールを用いて結晶構造を構築し、得られた座標情報を元にWinmostar Cloudで可視化できるようにした。

機能2: 分子の対称性の自動判定

・複雑な分子では、人間の目で全ての対称要素を見つけ出すのは困難な作業である。

(空間群まで入れると難しいので、)今回は分子の対称性(点群)の自動判定及び可視化を行うことにした。

方法1: 結晶構造のモデリング

結果1: 結晶構造のモデリング

○結晶構造の構築に必要な情報

- ・格子定数(a, b, c, α , β , γ)
- ・空間群(1~230)
- ・同位点(座標データ)

○結晶構造の構築手順

1. 格子定数から格子ベクトルA,B,Cを算出
2. 座標系を実験室座標から分率座標に変換
3. 空間群による対称操作
4. 分率座標系から実験室座標系に逆変換
5. 得られた原子の座標・格子の情報をモデリング

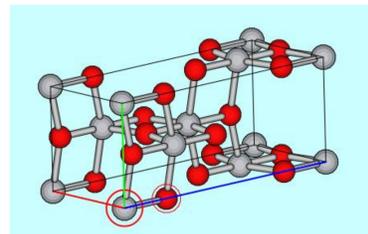
○CIFファイルの可視化

結晶の情報を保存するフォーマットとしてCIFファイルがある。CIFファイルには格子定数、空間群および最小の座標情報である同位点データしか書かれておらず、結晶構造の描画には適切な対称操作が必要になる。

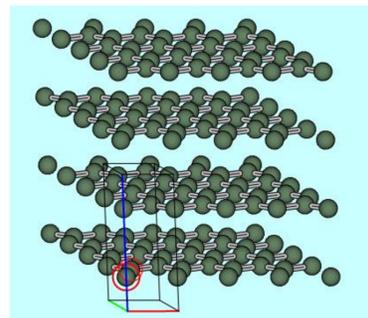
CIFファイルから可視化に必要な情報を読み取り、方法1で説明された手順で結晶構造を構築、Winmostar Cloudで描画を行った。

○CIFデータベースの構築

サーバー上にユーザーのアップロードしたCIFファイルを保存し、ブラウザに一覧を表示できるようにした。ユーザーはファイル名をクリックすることでCIFファイルの可視化を行うことができる。



TiO₂ (anatase, I4₁/amd)



C (graphite, P6₃/mmc)

方法2: 分子の対称性の自動判定

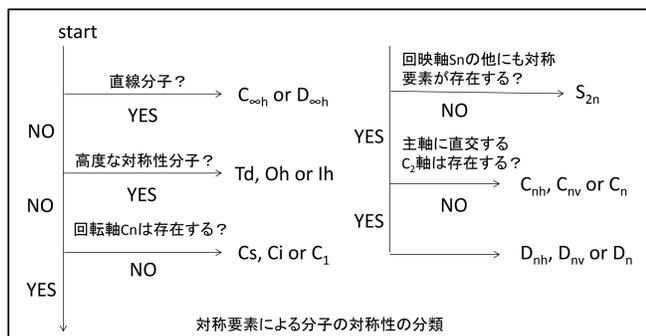
分子の座標情報を元に対称要素をまず探索する。
得られた対称要素の情報を元に対称性を分類する

○対称要素の探索

点群に含まれる対称操作は次の4通り
回転操作 鏡映操作 回映操作 反転操作

○対称性の分類

探索によって見つかった対称要素の情報を元に、右図に示すフローチャート式に対称性を分類し、属する点群を判定する。

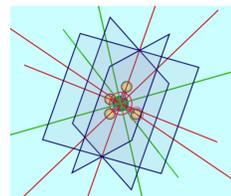


結果2: 分子の対称性の自動判定

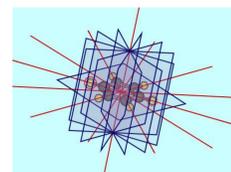
Winmostar Cloudでモデリングし、クリーンした分子の構造情報を元に対称性の自動判定を行ったところ、分子の対称性の自動判定ができた。(右図) また対称要素を次のように可視化した。

赤線: 回転軸 緑線: 回映軸 青面: 鏡映面

このように対称要素を可視化することで、解析の結果をユーザーの目で確認できる。
対称要素の可視化をOn/Offできるため、分子の対称性を学ぶための学習ツールとしての利用も期待できる。



メタンの対称性 (Td)



ベンゼンの対称性 (D_{6h})

今後の課題

移植性を上げるために対称操作モジュールはWinmostar Cloudとは独立のバイナリとして作成した。
これらの新機能をパッケージ版Winmostar™でも使用できるようにするために現在開発中である。