

周期性を持つ化学構造データの解析を支援するアプリケーションの開発

○三瓶 匡史

E-Mail: masashi_sampe@frontier.hokudai.ac.jp

【序論】 周期性を持つ結晶の化学構造は単位格子中の原子とその座標、及び基本並進ベクトルを用いて表現できる。人工力誘起反応法と周期境界条件を組み合わせることで安定な結晶の構造を探索することが可能となった^[1]。しかし、膨大な数の構造データが得られた場合、それらを目視で分析するのは多大な労力を必要とする。そこで以前から開発を行ってきた化学構造解析支援アプリケーション「CoordMatch」を周期性を持つ化学構造データに拡張した。このアプリケーションは単位格子に含まれる原子のXYZ座標と並進ベクトルが記載されたテキストファイルを用意すれば、マウス操作のみで容易に利用できる。本発表では、アプリケーションの機能とアルゴリズムの説明、及び実演を行う。

【動作環境】 Windows10にて確認。

【機能】 本アプリケーションは下記の機能を有する。

1. 周期性を持つ化学構造データの分類

単位格子中の原子を並進ベクトル方向に並べて配置した際の座標中に存在する化学構造を結合様式から判断し、分類を行う（図1）。結晶に限らず、周期性を持つ構造であれば分類が可能である。

2. 化学構造データの3Dモデル表示

化学構造データを読み取り、分子を3Dの球棒モデルで表示する。単位格子のみでの表示、隣接する単位格子を並べての表示の切替えが可能である（図2）。



図1 アプリケーションの実行画面

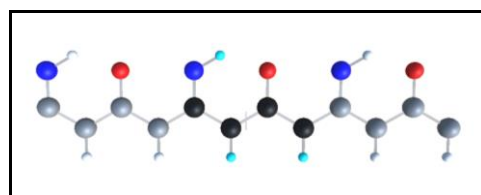
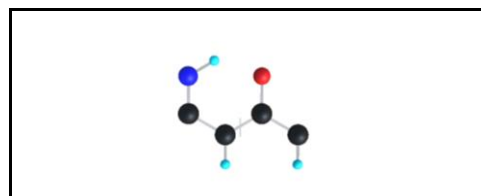


図2 3Dモデル表示
(上：単位格子のみ表示，
下：隣接する単位格子を並べて表示)

【展望】 現在、本アプリケーションの開発言語はC#であるが、より高速なプログラミング言語Rustで一部のアルゴリズムを実装することで実行速度の改善を行う。

[1] M. Takagi, *et al. Phys. Rev. B*, **2017**, *95*, 184110.