

材料設計統合プラットフォーム

奥野 好成*

Advance/Material Design System Platform

Yoshishige Okuno*

材料設計統合プラットフォームの開発を行い、プロトタイプを完成した。材料設計統合プラットフォームでは、モデリングのためのビルダー機能、計算ソルバーとのインターフェイス機能を有している。ビルダーは、分子構造を構築する分子ビルダー、結晶構造を構築する結晶ビルダー、高分子構造を構築する高分子ビルダーから構成される。それにより、分子、結晶、高分子のみならず、タンパク質、液体、固体等、多岐にわたる材料のモデル化がマウス操作とボタン操作で可能である。インターフェイスは、計算条件の指定、計算ソルバーでの計算の実行、計算結果の出力ファイルからの最終構造の取得等の機能を有する。現在、インターフェイスが可能となっている計算ソルバーは、Advance/OCTA、Advance/Biostation、Advance/PHASE である。また、OpenMX、Modylas、Gaussian09、GAMESSとのインターフェイスを現在開発中である。

Key word: Material Design, Platform, Guraphics Interface, Molecular modeling

1. 背景

材料設計統合システム[1]では、多様な研究対象（分子、蛋白質、ポリマー、結晶等）に対する種々のシミュレーション手法（量子化学・密度汎関数法・バンド計算・分子力学・分子動力学法・粗視化動力学法等）による計算と数多くの解析を、すべて1つの統合システムで行うことが必要である。

そのために必須となるのが、材料設計統合プラットフォームである。ここでの材料設計統合プラットフォームは、種々のシミュレーション手法に基づくソフトウェアを有機的に統合して、全体として高度で複雑なシミュレーションを自由自在に実行するための支援環境ととらえている（図1）。

一方で、わが国での個別のシミュレーションソフトは世界トップレベルにあり、大学や独立行政法人等で作られたシミュレーションソフトには大変すばらしいものが数多く存在しており、個々のシミュレーション手法に基づくソフトウェアは既に存在している。問題点は、使い難いことが普及の障害に

*アドバンスソフト株式会社 技術第2部

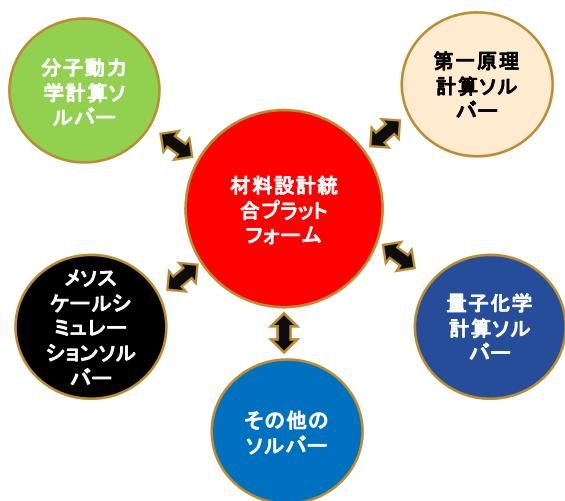
2nd Technical Division, AdvanceSoft Corporation

図 1 材料設計統合システムの構成

なっているだけである。使い難い理由としては、グラフィックインターフェイスの不十分さのみならず、シミュレーションソフト間の連携が容易にできないことがある。従って、材料設計統合プラットフォームによってこれらのソフトウェアを統合すれば使い勝手がよくなりシミュレーションの普及にもつながると思われる。

そこで、当社では、材料設計統合プラットフォーム

ムの開発を行った。統合プラットフォームに必要な機能としては、モデル化を行うビルダー、計算ソルバーとの接続を行うインターフェイス、計算結果を解析するビジュアライザである。しかし、これらをすべて開発するには多大な労力と費用がかかってしまう。そこで、計算結果を解析するビジュアライザ部分は既存の計算ソフトウェアに十分な機能があることを踏まえ、今回の開発では、モデル化を行うビルダー、計算ソルバーとの接続を行うインターフェイスに絞った。

開発した材料設計統合プラットフォームでは、モデリングのためのビルダー機能、計算ソルバーとのインターフェイス機能を有している。ビルダーは、分子構造を構築する分子ビルダー、結晶構造を構築する結晶ビルダー、高分子構造を構築する高分子ビルダーから構成される。それにより、分子、結晶、高分子のみならず、タンパク質、液体、固体等、多岐にわたる材料のモデル化がマウス操作とボタン操作で可能である。インターフェイスは、計算条件の指定、計算ソルバーでの計算の実行、計算結果の出力ファイルからの最終構造の取得等の機能を有する。現在、インターフェイスが可能となっている計算ソルバーは、Advance/Biostation [2]、Advance/PHASE [3]、Advance/OCTA [4]であり、また、OpenMX [5]、Modylas [6]、Gaussian09 [7]、GAMESS [8]とのインターフェイスも開発中である。

2. 材料設計統合プラットフォームの概略

材料設計統合プラットフォームの画面構成を図2に示す。画面上部に設定項目選択部があり、そこで、適当なボタンをマウスで選ぶと3Dビュー画面やダイアログが表示される。3Dビュー上で、分子、高分子、結晶等をモデル化していく。その際、原子種を選んだり、結合距離を変えたり、格子定数を選んだりといった数々の操作は、3Dビュー上のマウス操作やダイアログ内のボタン操作・手入力操作等で行うようになっている。

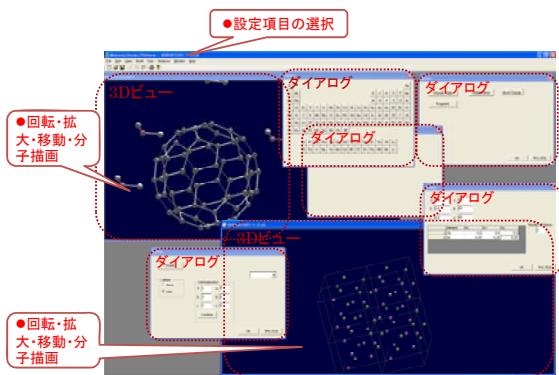


図 2 材料設計統合プラットフォームの画面構成

3. ビルダーの機能

3.1. 分子ビルダー

分子ビルダーの主な機能を図3に示す。これらの機能を、実際の分子モデル構築例に沿って以下説明する。

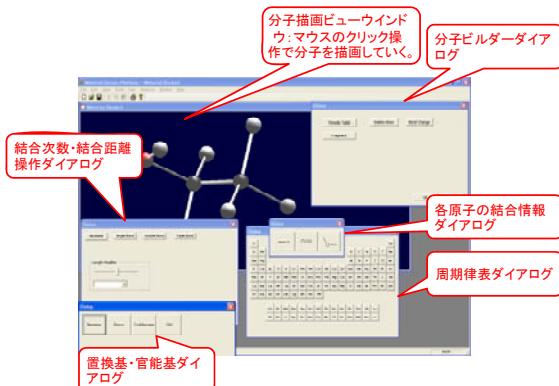


図 3 分子ビルダーの主な機能

材料設計統合プラットフォームを起動させた画面を図4(a)に示す。この画面の3Dビュー上の適当な位置でマウスをクリックするとメタン(CH_4)が表示される(図4(b))。さらにこのメタンの水素原子部分にカーソルを移動させマウスをクリックすると水素原子が炭素原子に置き換わると共に炭素原子に水素原子が3個付随し、エタン(C_2H_6)が構築できる(図4(c))。このようにして分子構造を描いていくことができる。

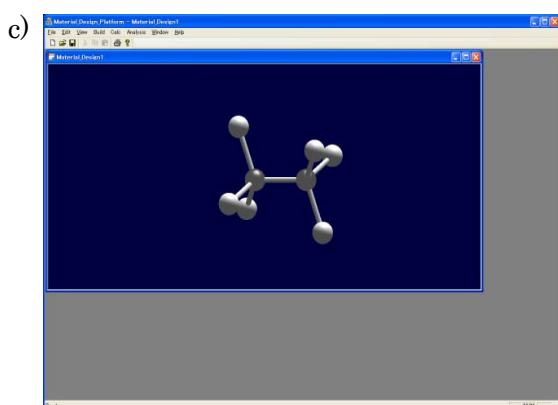
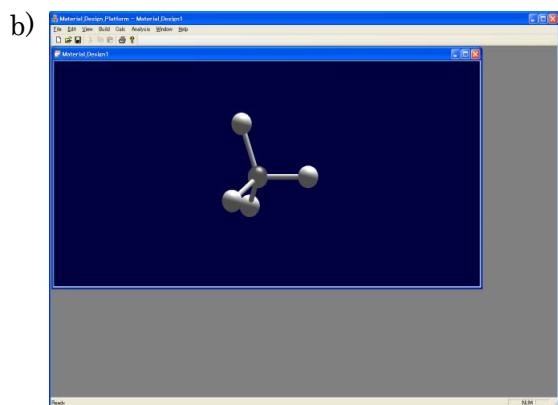
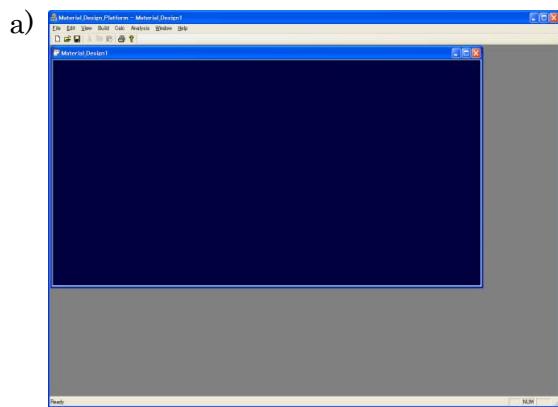


図 4 エタンの構築

原子種の選択等、数々の作業は、分子ビルダーダイアログを立ち上げて行う。画面上部の設定項目選択部の「Build」から「Molecular Build」を選ぶと分子ビルダーダイアログが立ち上がる（図 5）。

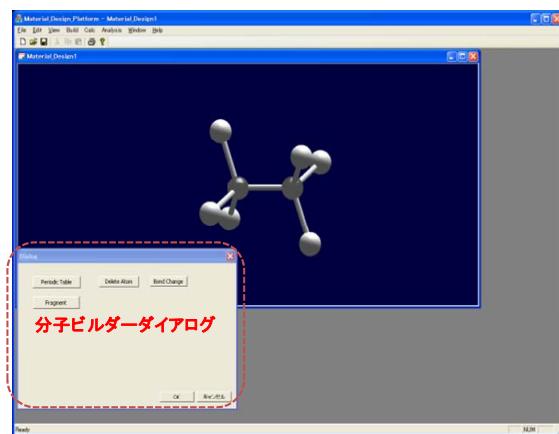


図 5 分子ビルダーダイアログ

そこに、「Periodic Table」、「Delete Atom」、「Bond change」、「Fragment」ボタンがあり、各々をクリックして、周期律表ダイアログの起動、原子削除のアクチベーション、結合調整ダイアログの起動、フラグメントダイアログの起動を行う（図 6）。ただし、結合調整ダイアログの起動は、「Bond change」ボタンクリック後、対象となる結合を作っている 2 個の原子をクリックする必要がある。



図 6 分子ビルダーダイアログから、周期律表ダイアログ表示、結合調整ダイアログ表示、フラグメントダイアログ表示を行った図

周期律表ダイアログから酸素原子をマウスクリックすると、酸素原子の結合数選択ダイアログが起動される。結合数 2 のボタンを選んだ後、3D ビュー中エタンの水素原子をクリックすると、水素原子が酸素に置き換わり、その酸素原子に水素原子が 1 個付随したエタノール構造が出来上がる（図 7）。

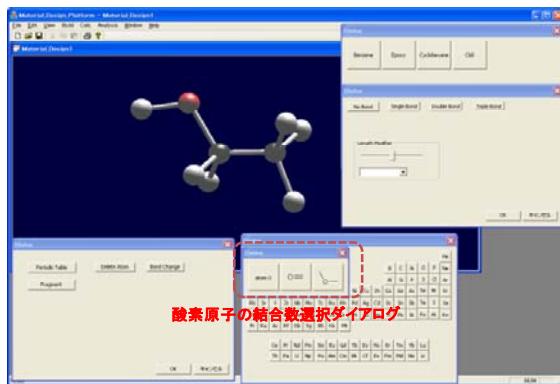


図 7 エタノールを構築した図

一方、フラグメントダイアログには頻繁に利用することが見込まれる分子・官能基・置換基が用意されている。例えば、ベンゼンボタンをクリックした後、エタノールの OH 基の水素をクリックすると、水素をフェニル基に置き換えることができる。そのままだと 3D ビュー中からフェニル基部分がはみ出てしまうが、マウスの左右ボタンをクリックしながらドラッグすることで、分子表示の大きさを縮小し、3D ビュー中におさまるようにできる（図 8）。

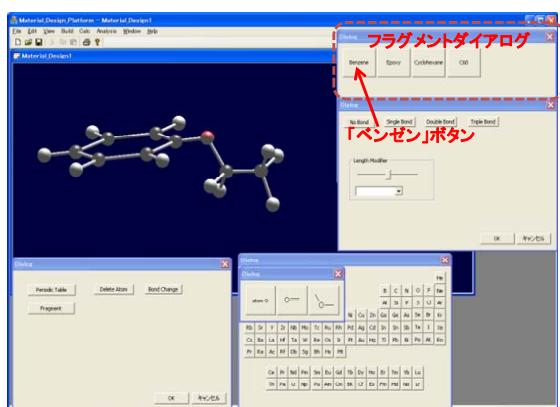


図 8 エタノールの OH の水素をフェニル基に置き換えた図

結合調整ダイアログでは、結合次数の変更、結合の切断や新しい結合の設定、結合距離の変更等が可能である。分子ビルダーダイアログ中の「Bond change」ボタンクリック後、エチル基の 2 個の炭素をクリックして結合調整ダイアログを起動し、ダイアログ中の「Length modifier」のコンボボック

スから「Group」を選択し、スライダーをドラッグして動かすことで結合を延ばすことができる（図 9）。

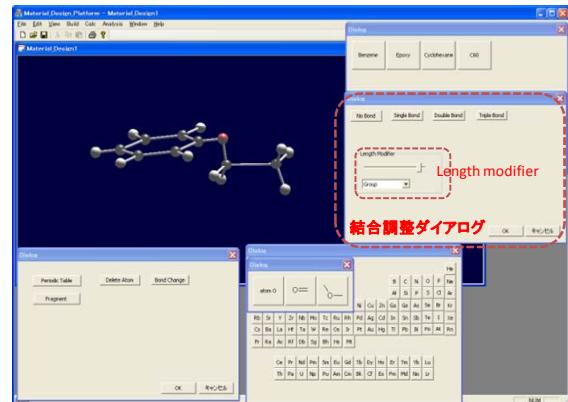


図 9 エチル基の炭素一炭素結合を伸ばした構造

また、結合調整ダイアログ中の「No Bond」ボタンをクリックして、炭素一炭素結合の結合次数を 0 にして切断することもできる（図 10）。



図 10 エチル基の炭素一炭素結合を切断した図

分子ビルダーダイアログの「Delete Atom」をクリックすると、原子削除機能がアクチベーションされる。この状態で酸素原子をクリックすると、酸素原子が削除される（図 11）。



図 11 酸素原子を削除した図

さらに、3D ビュー上でマウスをクリックしながらドラッグすることで、並進・回転させ、構造を確認することができる（図 12）。

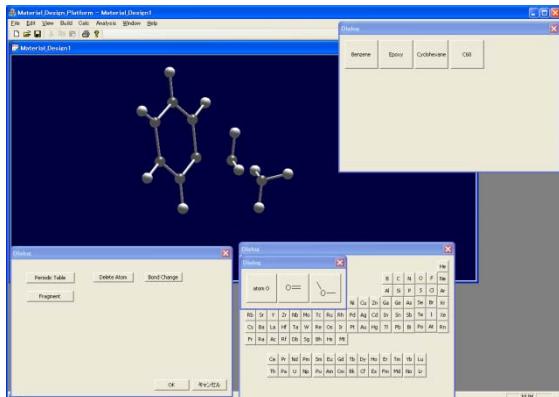


図 12 3D ビュー内で分子構造を並進・回転させた図

以上、主な機能を、分子モデル構築手順に従って説明したが、その他にも数々の機能がある。以下にその他の機能を列挙しておく。

- ・マウスドラッグによる原子位置の移動
- ・マウスドラッグによる原子団の移動
- ・UNDO・REDO 機能
- ・結合次数の変換
- ・原子ラベルや原子種の表示
- ・カルテシアン座標軸の表示

3.2. 結晶ビルダー

結晶構造の構築は、分子や高分子と異なり、格子定数や座標の入力を行うことが基本となる。結晶ビ

ルダーの主な機能を図 13 に示しておく。



図 13 結晶ビルダーの主な機能

具体的な機能は、実際の結晶モデル構築例に沿って以下説明する。まず、画面上部の設定項目選択部の「Build」から「Crystal Build」を選び、結晶ビルダーダイアログを起動した後、結晶ビルダーダイアログ中の「Create」ボタンをクリックして、結晶構造入力ダイアログを立ち上げる。そして、結晶構造入力ダイアログ中に、格子定数、セル中の原子数、原子種、各原子種のフラクショナル座標を入力する（図 14）。

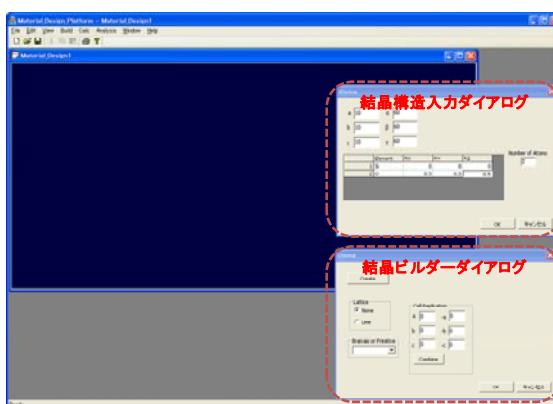


図 14 結晶構造入力ダイアログを立ち上げ、格子定数等を入力した状態

結晶構造入力ダイアログで「OK」ボタンをクリックすると、結晶構造が表示される（図 15）。

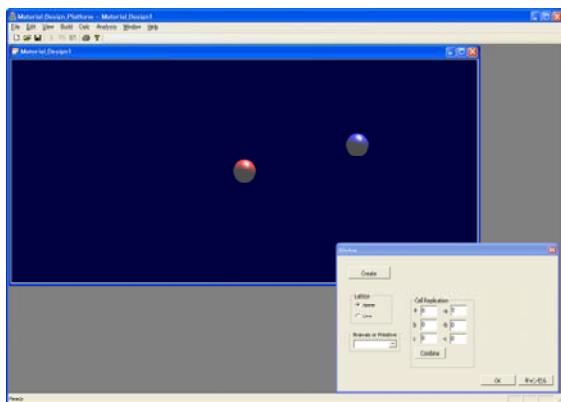


図 15 結晶構造を作成した絵

結晶ビルダーダイアログ中の「Lattice」のラジオボタンの「Line」にチェックを入れ、「Cell Replication」に数値を入れると、複数のセルを表示できる（図 16）。

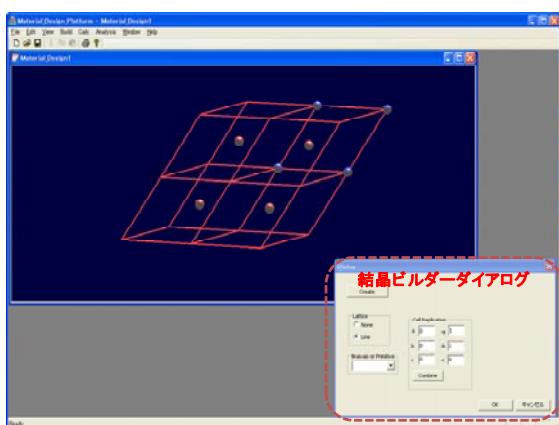


図 16 複数セルを表示した画面

「Cell Replication」の「Combine」ボタンをクリックして、セルをまとめることができる（図 17）。

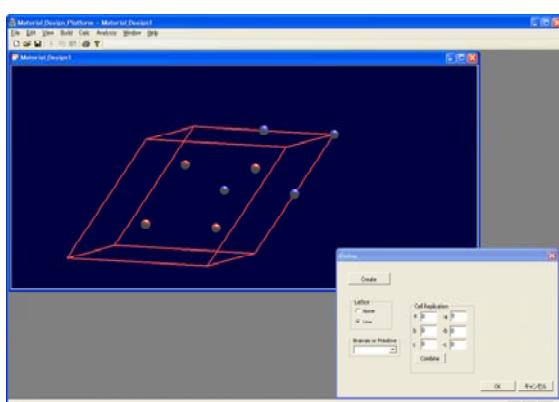


図 17 複数セルを 1 つにまとめた状態図

以上のような方法で、結晶構造をモデル化することができます。

一方、結晶構造データベースの CIF ファイルから構造を表示させて利用することもできる。それには、まず、画面上部の設定項目選択部の「File」から「Open」を選び、入力ファイル名指定画面を表示させる（図 18）。

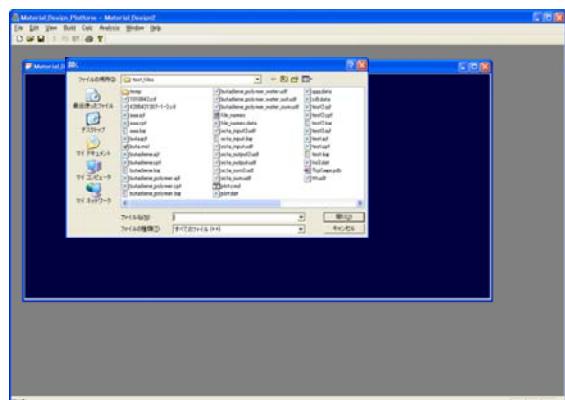


図 18 入力ファイル名指定画面を表示させた状態

そして、ファイル名を指定して、「開く」をクリックすると、結晶構造が表示される（図 19）。

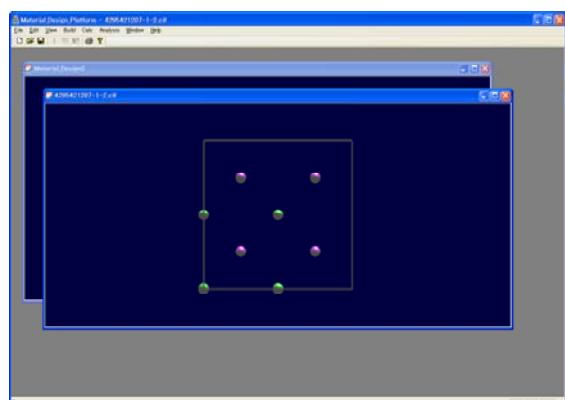


図 19 CIF ファイルから結晶構造を読み取った状態

ただし、この状態ではブラベ格子になっている。基本格子に変換するには、画面上部の設定項目選択部の「Build」から「Crystal Build」を選び、結晶ビルダーダイアログを起動した後、結晶ビルダーダイアログ中の「Bravais or Primitive」コンボボック

スから「Primitive」を選択してやればよい(図 20)。

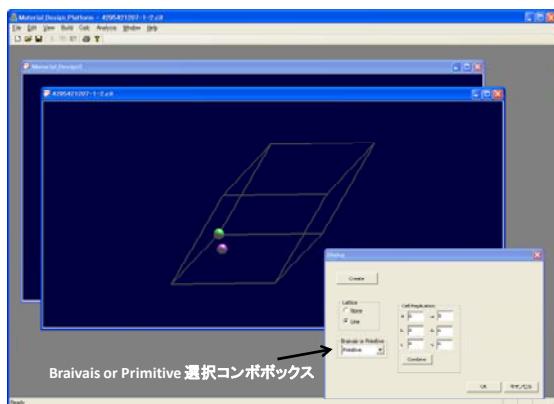


図 20 基本格子に変換した状態

以上、主な機能を、結晶モデル構築手順に従って説明したが、その他にも数々の機能がある。以下に他の機能を列挙しておく。

- ・マウスドラッグによる並進・回転・拡大・縮小表示
- ・UNDO・REDO 機能
- ・結合次数の変換
- ・原子ラベルや原子種の表示
- ・カルテシアン座標軸の表示

3.3. 高分子ビルダー

高分子ビルダーの主な機能を図 21 に示す。これらの機能を、実際の高分子モデル構築例に沿って以下説明する。

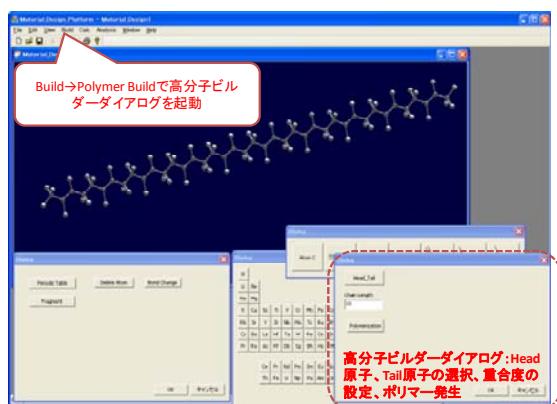


図 21 高分子ビルダーの主な機能

高分子作成の第 1 ステップは、分子ビルダーによ

ってモノマーを構築することである。「3.1.分子ビルダー」にて説明した方法と同様の方法で、ポリマーのモノマーを構築した絵を図 22 に示す。

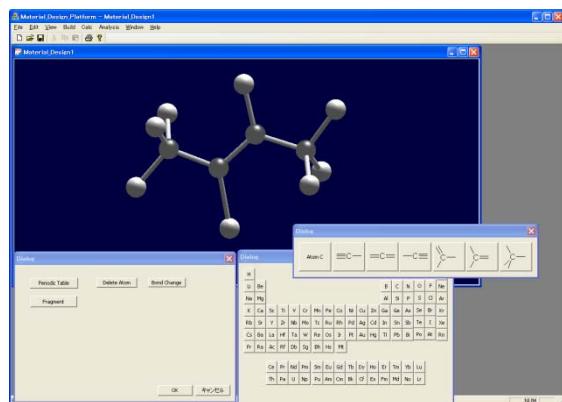


図 22 分子ビルダーで構築したポリマーのモノマー

第 2 ステップで、高分子ビルダーを起動しポリマーを構築する。画面上部の設定項目選択部の「Build」から「Polymer Build」を選ぶと高分子ビルダーダイアログが立ち上がる(図 23)。

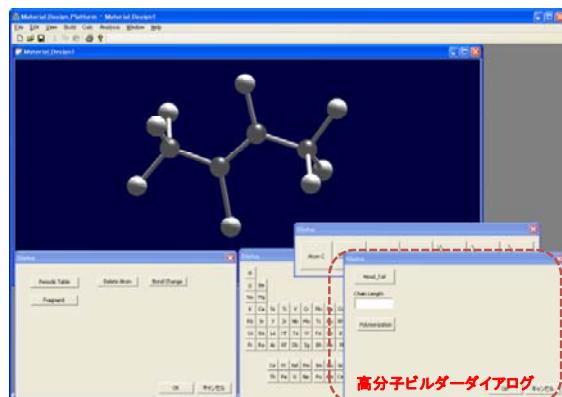


図 23 高分子ビルダーを起動した状態

高分子ビルダーダイアログ中の「Head-Tail」ボタンをクリックした後、3D ビュー内の Head 原子と Tail 原子をクリックする。そして、高分子ビルダーダイアログ中の「Chain Length」欄に 10 と入力した後、「Polymerization」ボタンをクリックすると、10 量体のポリマーが構築される。そのままでは、3D ビュー画面からはみ出してしまうが、マウスクリックとドラッグで、縮小・並進により構造を 3D ビュー画面内に収めることができる(図 24)。

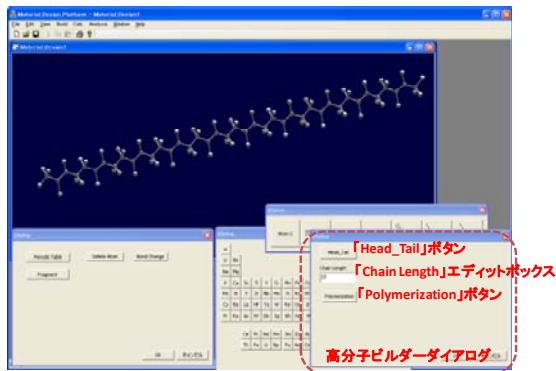


図 24 ポリマー

現時点での高分子生成機能は、ホモポリマーに限られている。ブロック共重合体・ランダム共重合体・グラフト共重合体の生成機能は現在開発中である。

4. インターフェイスの機能

4.1. Advance/Biostation インターフェイス

分子ビルダーで構築した分子や、高分子ビルダーで構築した高分子に関して、分子軌道計算を Advance/Biostation で行うことができる。その概略図を図 25 に示す。

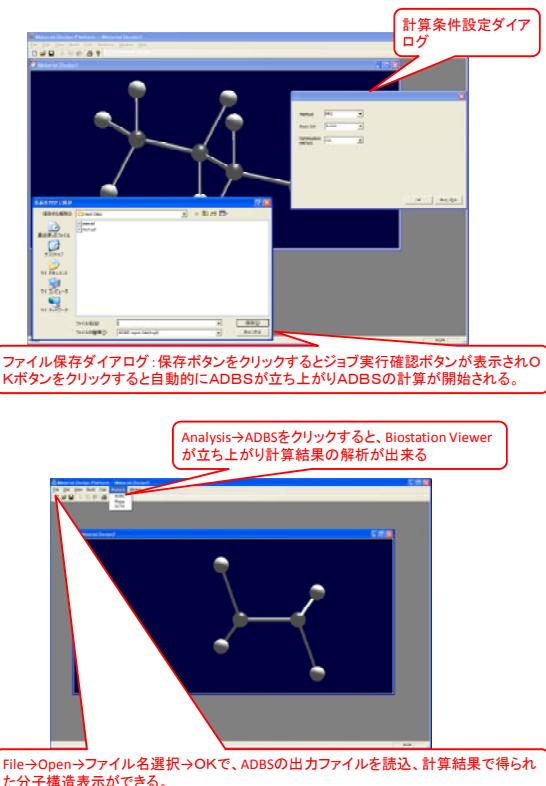


図 25 Advance/Biostation(ADBS)の主な機能

分子ビルダーや高分子ビルダーでモデルを構築後、画面上部の設定項目選択部の「Calc」から「ADBS」を選ぶと Advance/Biostation 条件設定ダイアログが立ち上がる。このダイアログ内で各種計算条件、即ち、計算手法 (HF、DFT、MP2 等)、基底関数 (6-31G、6-31G* 等)、最適化手法 (BFGS、CG) 等を指定する (図 26)。

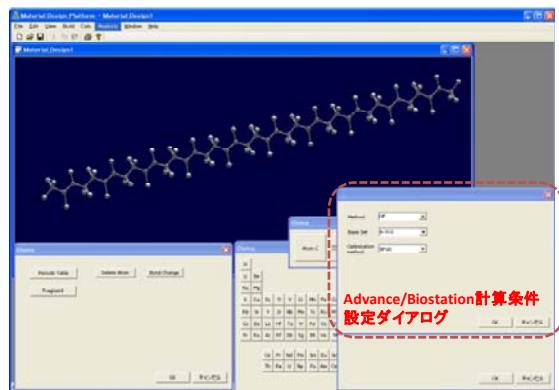


図 26 Advance/Biostation 条件設定ダイアログでの条件設定

そして、「OK」ボタンをクリックすると、Advance/Biostation の入力ファイル保存画面が表示される (図 27)。ファイル名入力後、「保存」ボタンをクリックすると、「入力ファイルを修正せずに計算を実行するか?」のダイアログが表示され、「Yes」をクリックすると、自動的に Advance/Biostation の計算が実行される (図 27)。詳細な計算条件を指定したい場合は、「No」をクリックすると入力ファイルの内容が Notepad で表示され、入力ファイルに種々の計算条件を書き込むことができ、Notepad 終了後、自動的に Advance/Biostation の計算が実行されるようになっている。

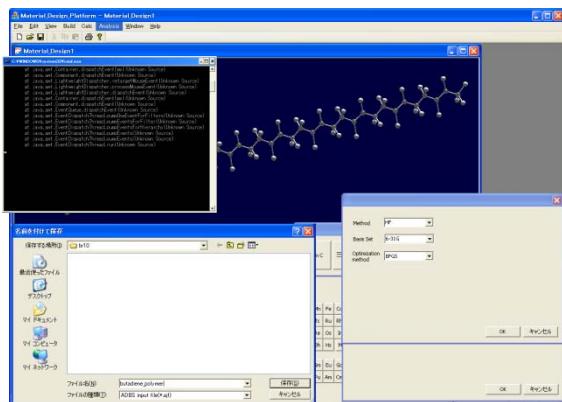


図 27 Advance/Biostation の計算実行中の絵

計算結果の解析は、画面上部の設定項目選択部の「Analysis」から「Molecular Build」を選ぶと BiostationViewer が立ち上がる（図 28）ので、BiostationViewer で解析を行うことができる。

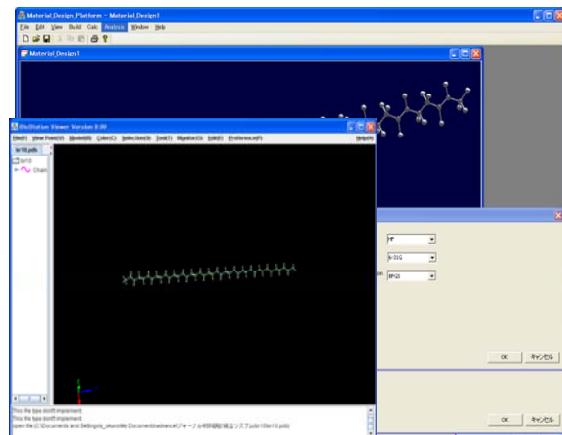


図 28 材料設計統合プラットフォームから BiostationViewer を起動した画面

なお、高分子のフラグメント分割の機能も装備済みであり、フラグメント分割したフラグメント分子軌道法[9]の計算を自動的に直接行うことができるようになっている。

4.2. Advance/PHASE インターフェイス

Advance/PHASE インターフェイスの概略を図 29 に示す。

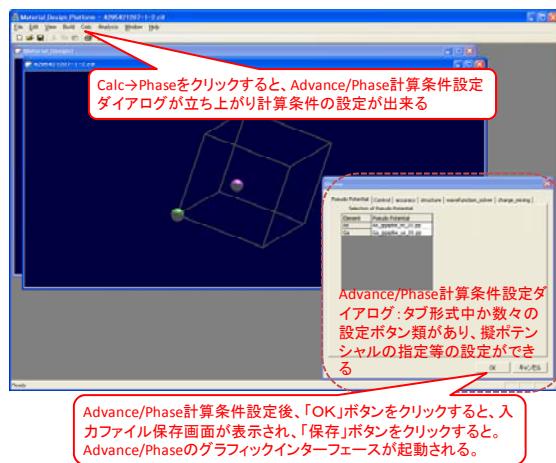


図 29 Advance/PHASE インターフェイスの概略図

結晶構造構築後、画面上部の設定項目選択部の「Calc」から「PHASE」を選ぶと Advance/PHASE 計算条件設定ダイアログが立ち上がる（図 30）。このダイアログではタブ形式になっており、それぞれのタブをクリックして、その中のボタン類を操作することで、様々な条件を設定できる。例えば図 30 の画面表示では、各原子の擬ポテンシャルを選択できるようになっている。

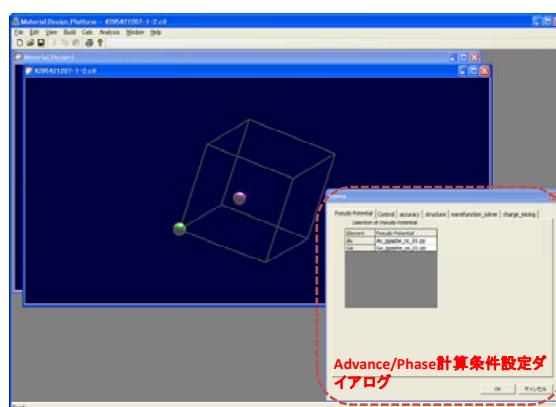


図 30 Advance/PHASE 計算条件入力ダイアログ

計算条件設定後、「OK」ボタンをクリックすると、Advance/PHASE 入力ファイル保存画面が表示される（図 31）。

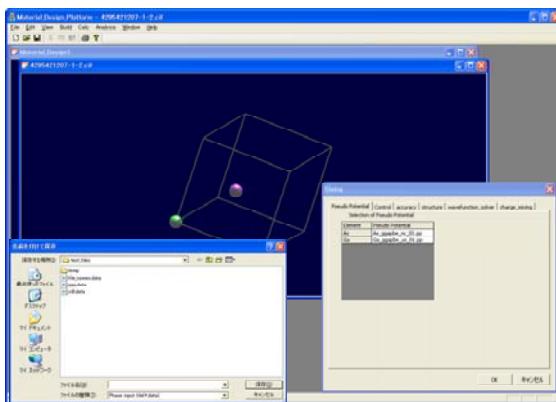


図 31 Advance/PHASE 入力ファイル保存画面

ファイル名を指定し「保存」ボタンをクリックすると、本入力ファイルを読み込んだ状態で、Advance/PHASE のグラフィックインターフェイス CHASE-3PT を起動することができる（図 32）。そして、そのまま、Advance/PHASE の計算を実行することが可能である。

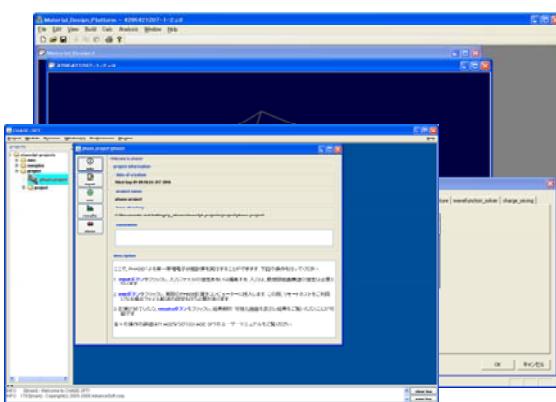


図 32 材料設計統合プラットフォームから
Advance/PHASE のグラフィックインターフェイ
ス CHASE-3PT を起動した状態

4.3. Advance/OCTA インターフェイス

分子ビルダーで構築した分子や、高分子ビルダーで構築した高分子に関して、分子動力学計算を Advance/OCTA で行うことができる。その概略図を図 33 に示す。

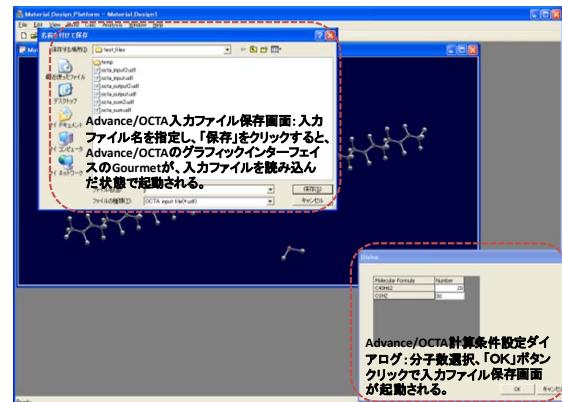


図 33 Advance/OCTA インターフェイスの概略

分子ビルダーや高分子ビルダーでモデルを構築後、画面上部の設定項目選択部の「Calc」から「OCTA」を選ぶと Advance/OCTA 条件設定ダイアログが立ち上がる。このダイアログ内で分子の数を指定する。図 34 の例では、ブタジエンポリマー 20 分子と水 30 分子を指定している。

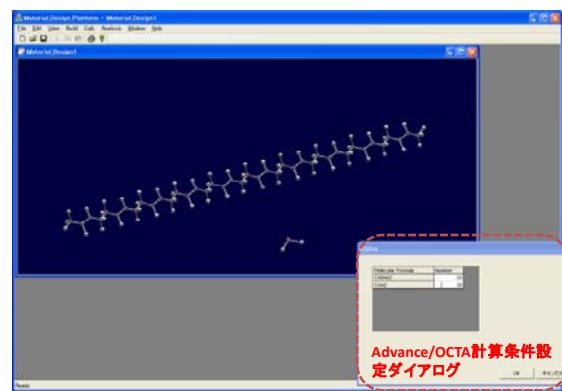


図 34 ブタジエンポリマーと水分子からなる系の Advance/OCTA インターフェイスでの分子数設定画面

分子数指定後、「OK」ボタンをクリックすると、Advance/OCTA の COGNAC[10]入力ファイル保存ダイアログが表示される（図 35）。

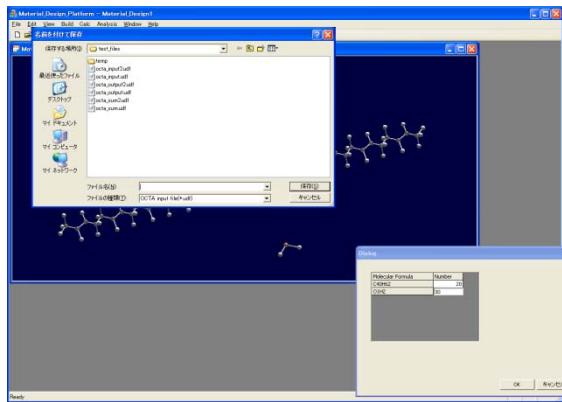


図 35 Advance/OCTA の COGNAC[9]入力ファイル保存ダイアログが表示された状態

入力ファイル名を入力後、「保存」ボタンをクリックすると、入力ファイルの保存と同時に Advance/OCTA のグラフィックインターフェイス Gourmet が立ち上がり、計算条件設定画面が起動される（図 36）。

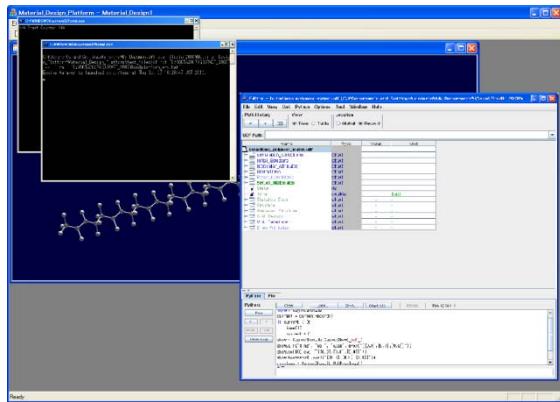


図 36 Advance/OCTA のグラフィックインターフェイス Gourmet が立ち上がり、計算条件設定画面が起動された状態

本入力ファイルには、ブタジエンポリマー20分子と水30分子からなる系で、ポテンシャルパラメータのデフォルトとして Dreiding ポテンシャル[11]のパラメータが組み込まれている。動力学計算の詳細な条件設定は Advance/OCTA の通常の利用法に従い、この画面で行うことができる。

条件設定後、動力学計算をそのまま実行することができる（図 37）。

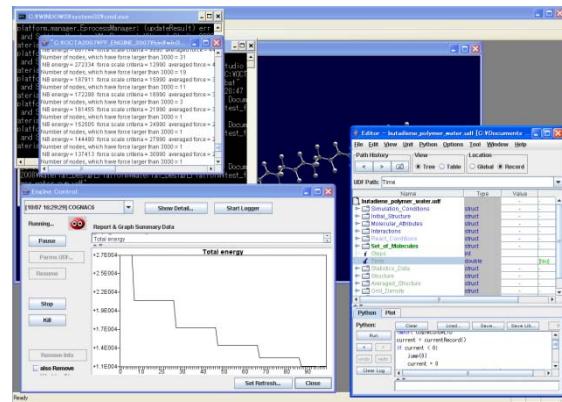


図 37 Advance/OCTA 実行中の画面

計算の実行状況は、Advance/OCTA のグラフィックインターフェイス Gourmet でモニターすることができ、計算終了後は、Gourmet で出力ファイルを読み込み、種々の計算結果解析を行うことができる（図 38）。

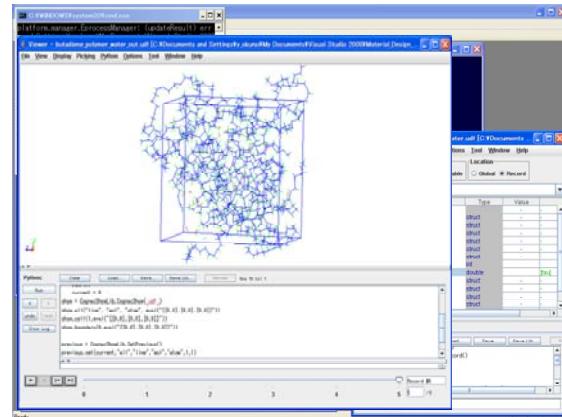


図 38 ブタジエンポリマー20分子と水30分子からなる系に対する分子動力学計算の途中の構造

現時点で、材料設計統合プラットフォームに組み込まれている分子動力学計算用ポテンシャルパラメータは、Dreiding ポテンシャル[11]のみであるが、UFF ポテンシャル[12]と Amber ポテンシャル[13]を組み込む開発を行う予定である。

5. 今後の開発項目

材料設計統合プラットフォームの、今後の開発予定項目を以下に挙げておく。

- ・OpenMX、Modylas、Gaussian09、Gamess との入出力インターフェイスの開発
- ・Advance/OCTA での分子動力学計算で用いるポテンシャルパラメータの拡充。UFF ポテンシャル[12]と Amber ポテンシャル[13]を組み込む。
- ・結晶表面構築機能の開発
- ・2つの結晶表面の接合機能の開発

6. まとめ

材料設計統合プラットフォームのプロトタイプを完成した。材料設計統合プラットフォームに、モデリングのためのビルダー機能、計算ソルバーとのインターフェイス機能を装備した。ビルダーは、分子構造を構築する分子ビルダー、結晶構造を構築する結晶ビルダー、高分子構造を構築する高分子ビルダーから構成される。それにより、分子、結晶、高分子のみならず、タンパク質、液体、固体等、多岐にわたる材料のモデル化がマウス操作とボタン操作で可能となった。インターフェイスでは、計算条件の指定、計算ソルバーでの計算の実行、計算結果の出力ファイルからの最終構造の取得等の機能を装備した。現在、Advance/OCTA、Advance/Biostation、Advance/PHASEとのインターフェイスが可能となっている。今後、OpenMX、Modylas、Gaussian09、GAMESSとのインターフェイスを開発する予定である。

参考文献

- [1] 特願 2009-249482 【発明者】 奥野 好成、原田 広史、横川 忠晴 【特許出願人】 アドバンスソフト株式会社、独立行政法人物質・材料研究機構
- [2] Advance/Biostation, http://www.advancesoft.jp/product/advance_biostation/
- [3] Advance/PHASE, http://www.advancesoft.jp/product/advance_phase/
- [4] Advance/OCTA, http://www.advancesoft.jp/product/advance_octa/
- [5] OpenMX, <http://www.openmx-square.org/>
- [6] Modylas, <http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/>
- [7] Gaussian octa/ <http://www.gaussian.com/index.htm>: Gaussian 09, Revision A.1, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- [8] Gamess; <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>
- [9] K. Kitaura、T. Sawai、T. Asada、T. Nakano、M. Uebayasi: Chem. Phys. Lett. 312, 319 (1999).
- [10] COGNAC: T. Aoyagi, F. Sawa, T. Shoji, H. Fukunaga, J. Takimoto, M. Doi, Comput. Phys. Commun., 145, 267 (2002).
- [11] S. L. Mayo, B. D. Olafson, and W. A. Goddard, J. Phys. Chem. 94, 8897 (1990).

- [12] A. K. Rappe, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III, and W. M. Skiff, *J. Am. Chem. Soc.* 114, 10024 (2002).
- [13] W. D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, K. M. Merz Jr., D. M. Ferguson, D. C. Spellmeyer, T. Fox, J. W. Caldwell, and P. A. Kollman, *J. Am. Chem. Soc.* 117, 5179 (1995).