

材料設計統合システムとその利用事例

奥野 好成*

Advance/MaterialDesignSystem and Its Application Examples

Yoshishige Okuno*

材料設計統合システムの開発を進め、プロトタイプを完成した。材料設計統合システムでは、材料設計統合プラットフォームを中核とし、種々のシミュレーション手法に基づくソフトウェアを計算ソルバーとして位置づけ有機的に統合して、全体として高度で複雑なシミュレーションを実行できる。材料設計統合プラットフォームは、分子・結晶・高分子・カーボンナノチューブ構造の構築、計算条件の設定、計算ソルバーへのインターフェイスを担う。また、量子化学計算手法、密度汎関数法、バンド計算手法、分子力学法、分子動力学法、粗視化動力学法のシミュレーションが可能なものを計算ソルバーとして揃えている。これらのシミュレーション手法を目的に応じて使い分け、または組み合わせた解析を行うことができる。従って、分子、タンパク質、ポリマー、結晶、固体、液体、気体等、多岐にわたる材料をトータルに解析することが可能である。実際、材料設計統合システムを利用した解析をいくつか行った。ここでは、材料設計統合システムの内容とその操作法とその利用事例について説明する。

Key word: Material Design, Ab initio calculation, density functional, molecular dynamics, first principle calculation

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、全て一つの統合システムで行う（図 1）。これは、機能材料開発研究における解析対象が、分子、タンパク質、ポリマー、結晶、固体、液体、気体等、多岐にわたり、量子化学計算手法、密度汎関数法、バンド計算手法、分子力学法、分子動力学法、粗視化動力学法等の多くのシミュレーション手法を目的に応じて使い分ける必要があるからである。さらには、これらを組み合わせたシミュレーションを行う必要がある上、シミュレーション計算結果の解析方法も多様であるからである。

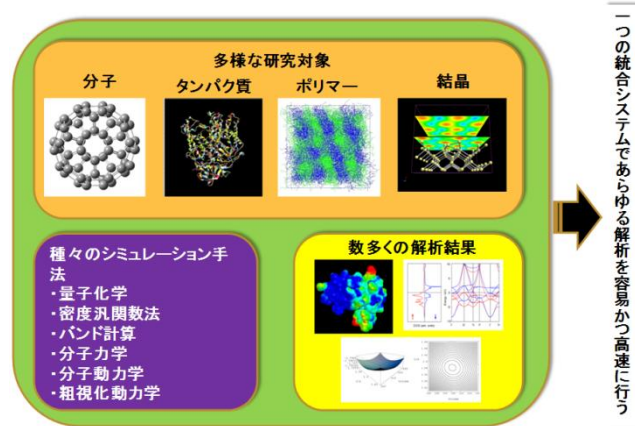


図 1 材料設計統合システムの概念図

もちろん、個別のシミュレーションソフトを複数別々に用いて解析を行うことは原理的には可能であるが、効率が悪い。その理由は、まず、解析対象が異なるたびにユーザーは別のシミュレーションソフトウェアを使う必要が生じ、その度に新しいソフトウェアの操作法を 1 からマスターしなければならない。第 2 に、異なるシミュレーション間の連

*アドバンスソフト株式会社 技術第 2 部

2nd Technical Division, AdvanceSoft Corporation

携を取るのが困難である。例えば、量子化学計算で得られたデータを利用して分子動力学計算を行うような場合、データのやりとりをユーザー自身が行わなければならない、大変な労力を要してしまう。

従って、開発した材料設計統合システムは、大幅に研究効率化を可能にすると考えられる。そして、それにより、欧米ソフトウェアに比べて劣っている材料設計ソフトウェア分野での優位性を確保し、欧米に比べて出遅れている国産シミュレーションソフトウェアの普及促進を行い、材料科学技術分野での競争力低下の危機を克服して、機能材料、生体物質、エネルギー利用材料の研究開発に貢献しようと考えている。

2. 材料設計統合システムとは

2.1. 概要

材料設計統合システムは、量子化学計算ソルバー、密度汎関数法等の第一原理計算ソルバー、分子動力学計算ソルバー、メソスケールシミュレーションソルバーを中心とし、それにその他のソルバーも組み込み、すべて材料設計統合プラットフォームから利用できるシステムである（図 2）。材料設計統合システムでのシミュレーションの対象は、エンジニアリングポリマー、燃料電池、リチウム電池、太陽電池、ナノ複合材料、界面活性剤、ドラッグデリバリーシステム、透過膜、鉱物、酸化物、金属、合金、触媒、溶媒、セラミック、半導体、医薬品、化学反応、吸着、分離、拡散等である。

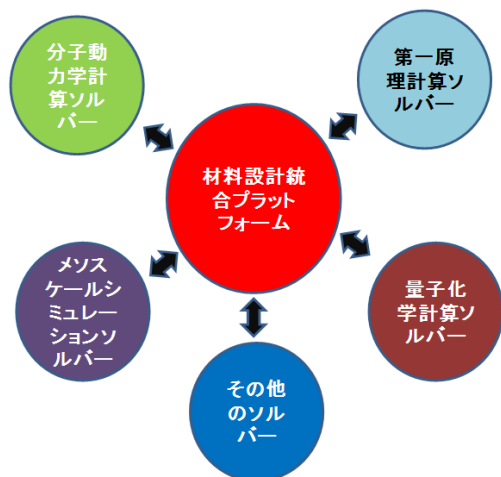


図 2 材料設計統合システム

2.2. 材料設計統合プラットフォーム

材料設計統合プラットフォームの機能としては、分子・溶液・固体・ポリマー・タンパク質等の 3 次元構造の作成を担うビルダー、シミュレーションソルバーへの入出力を担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を有する。しかし、これらを全て開発するには多大な労力と費用がかかってしまうため、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、現段階では、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機能を主に有する（表 1）。

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、カーボンナノチューブ構造を構築する CNT 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、ダイアログ形式での計算条件の指定、計算入力ファイルの作成、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。

表 1 材料設計統合プラットフォームの機能

分子ビルダー	マウスクリック操作による3次元分子構造の構築機能、水素を付加した原子やフラグメント単位での分子構築機能、結合距離や原子位置のクリック操作での容易な変更機能、3次元分子構造の拡大・縮小・並進・回転による容易な構造確認機能
結晶ビルダー	格子定数や座標入力による結晶構造構築機能、構造データベースから入手できるCIFファイル形式の読み込みによるブラベ格子での結晶構造表示機能、ブラベ格子から基本格子への自動変換機能、SuperCell の容易な構築機能
高分子ビルダー	モノマーからポリマーの構築機能（ホモポリマー等に対応）、高分子のフラグメント分子軌道計算に必要なフラグメント分割機能
CNTビルダー	カイラル指数入力によるカーボンナノチューブ構造の自動構築機能（アームチェア型、ジグザグ型以外にも対応）
計算ソルバーインターフェイス	分子・結晶・高分子ビルダーで構築した分子構造で計算条件を指定する機能、計算入力ファイルの構築機能、計算入力ファイルによる計算の実行機能、計算の出力ファイルから構造を読み取り3D構造を表示させる機能、Dreidingボテンシャル等の分子動力学パラメータ自動設定

2.3. 計算ソルバー

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、量子化学計算を行う ADBD [2]、密度汎関数法による第一原理バンド計算を行う Advance/PHASE [3]、メソスケールシミュレーションを行う Advance/OCTA [4]、局在数値基底密度

汎関数法シミュレータ OpenMX [5]である。その概要を表 2 にまとめた。

表 2 計算ソルバー

計算ソルバー	手法	主な解析対象
ADBS	フラグメント分子軌道法 量子化学計算手法	低分子、高分子、タンパク質
Advance/PHASE	密度汎関数法 擬ポテンシャル 平面波基底	金属、絶縁体、半導体、磁性体、誘電体、圧電体、ハーフメタル
OpenMX	密度汎関数法 擬ポテンシャル 局在数値基底 オーダーN法を装備	低分子、高分子、タンパク質、結晶、グラフェン、CNT
Advance/OCTA	分子・粗視化動力学法 原子間ポテンシャル 粗視化ポテンシャル	高分子、液体、樹脂、プラスチック、液晶

さらに、今後の開発で、分子動力学法シミュレータ Modylas[6]、量子化学計算プログラム Gaussian09[7]及び Gamess[8]へのインターフェイスを組み込む予定である。

2.4. 全体像

材料設計統合システムの全体像を図 3 に示す。

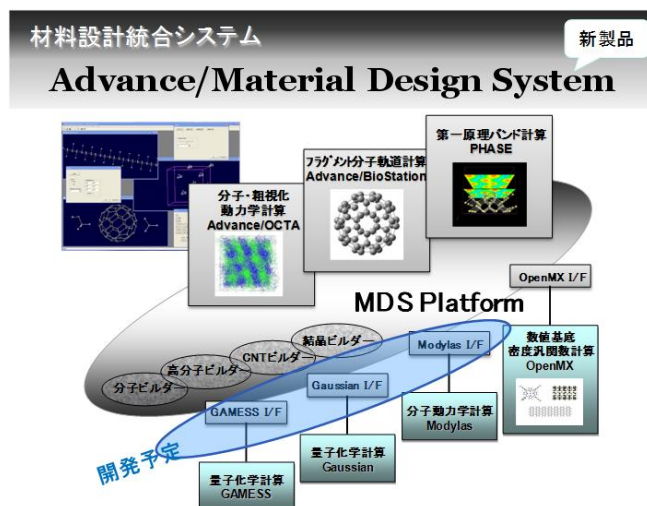


図 3 全体像

2.5. 材料設計統合システムのメリットと特徴

材料設計統合システムのメリットは以下の点にある

- ① Advance/OCTA 用のビルダー：OCTA 単独ではスクリプト言語を利用して入力データを作

成する必要あり。材料設計統合システムではマウスクリック操作で作成可能。

- ② OpenMX 用のビルダー・インターフェイス：OpenMX 単独では入力データをテキスト形式で作成する必要あり。材料設計統合システムではマウスクリック操作で可能。
- ③ ADBS のフラグメント分子軌道法計算[9]と分子動力学計算による高分子のトータル解析：フラグメント分子軌道法の電荷計算結果をそのまま OCTA の電荷データに利用可能。

開発した材料設計統合システムのプラットフォームやソルバー毎の特徴を表 3 に示す。

表 3 材料設計統合システムのメリット

材料設計統合システム	メリット
材料設計統合プラットフォーム	低価格。扱うソルバーの差異・優位性。
Advance/OCTA	低価格。応力歪み、ガス拡散、相分離構造、光学特性、体積弾性率、ガラス転移温度等の動的性質に関する解析可能。ADBSとの連携による高分子のトータル解析。ソースコード公開によるカスタマイズの容易さ。他社製品と比べて、知名度はOCTAが勝る。
Advance/PHASE	低価格、基本機能は他社製品と同等。精度の高い結果。バンド計算での信頼性。高い並列化効率。
ADBS	フラグメント分割による高速計算。高い並列化効率。タンパク質・高分子のFMO計算が可能。
OpenMX	無償。カーボンナノチューブ・グラフェン等を扱える。結晶系も対応。局在数値基底による高速化。オーダーN法による高速計算。電流-電圧特性の計算。並列計算可能。

一方、欧米において、統合システム開発は盛んで、アクセルリス社のマテリアルスタジオ[10]、サイノミクス社のサイマップス[11]、ケミカルコンピューティンググループ社のMOE[12]等があり、それらの代表核であるマテリアルスタジオと比べた場合の当社製品のメリットを、表 4 に示す。

表 4 当社製品のメリット

AMDS	Material Studio	当社製品のメリット
AMDSプラットフォーム	Material Studio プラットフォーム	低価格。扱うソルバーの差異・優位性。
Advance/OCTA	Discover, Mesocite	低価格。ADBSとの連携による高分子のトータル解析。ソースコード公開によるカスタマイズの容易さ。知名度はOCTAが勝る。
Advance/PHASE	CASTEP	低価格、基本機能は同等
ADBS	DMol3	低価格。タンパク質・高分子のFMO計算が可能。
OpenMX	DMol3	フリーソフト。カーボンナノチューブ・グラフェン等を扱える。結晶系も対応。

3. 材料設計統合システムの操作法

材料設計統合システムの画面構成を図 4 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、カーボンナノチューブ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 ビュー上でのマウス操作やダイアログ内でのボタン操作・手入力操作等で行うようになっている。



図 4 画面構成

分子ビルダー、結晶ビルダー、高分子ビルダー、CNT ビルダーを立ち上げた画面を図 5 に示す。

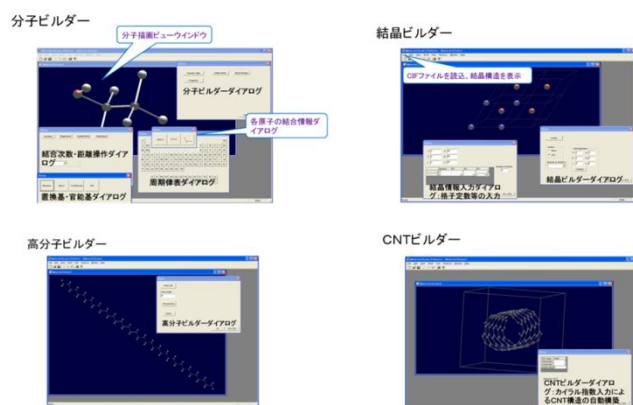


図 5 ビルダー

分子ビルダーでは、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が表示される。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、エタンが構築できる。このようにして分子構造を描いていくことができる。原子種を選択等、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。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。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。周期律表ダイアログから例えば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。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 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。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。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—炭素結合の結合次数を 0 にして切断することもできる。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。この状態で例えば酸素原子をクリックすると、酸素原子が削除される。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。その他の機能としては、マウสดラッグによる原子位置の移動、マウสด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がある。

結晶ビルダーでは、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。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。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。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。「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。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る。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。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。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「Braivais or Primitive」コンボボックスから「Primitive」を選択してやればよい。その他の機能として、マウสด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がある。

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。分子ビルダーの説明で示した方法と同様の方法で、モノマーを構築する。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。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」欄に例えば 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いが、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。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。

CNT ビルダーでは、2 つのカイラル指数を入力して「OK」ボタンをクリックするだけで、カーボンナノチューブ構造を構築することができる。カーボンナノチューブ構造構築と共に、周期境界セルの大きさも自動的に設定されるようになっており、そのまま、OpenMX 等の計算の入力構造になり得る。ADBS、Advance/PHASE、Advance/OCTA、OpenMX の計算条件設定に関するインターフェイスの画面を図 6 に、計算実行時の画面を図 7 に、計算結果解析時の画面を図 8 に示す。



図 6 インターフェイス：計算条件設定

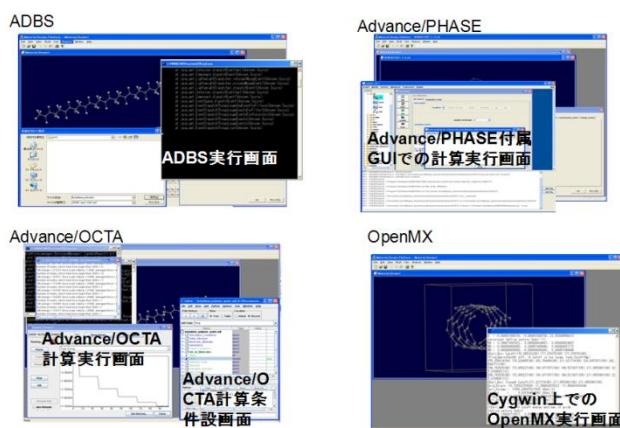


図 7 インターフェイス：計算の実行



図 8 インターフェイス：計算結果の解析

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 ADBD で行うことができる。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 ADBD 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。そして、「OK」ボタンをクリックすると、ADBD の入力ファイル保存画面が表示される。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 ADBD の計算が実行される。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 ADBD の計算が実行されるようになっている。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 が立ち上がるので、BiostationViewer で解析を行うことができる。また、高分子のフラグメント分割はモノマー単位で自動的に行われ、フラグメント分割した高分子のフラグメント分子軌道法[12]の計算を自動的に直接行うことができる。

PHASE インターフェイスでの計算条件の設定は、結晶構造構築後、画面上部の設定項目選択部の

「Calc」から「PHASE」を選んで Advance/PHASE 計算条件設定ダイアログを立ち上げて行う。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。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。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。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。

OCTA インターフェイスでは、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。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」を選べば 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。分子数指定後、「OK」ボタンをクリックすると、Advance/OCTA の COGNAC[13 入力ファイル保存ダイアログが表示される。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。本入力ファイルには、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[14]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。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。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[14]のみであるが、UFF ポテンシャル[15]と Amber ポテンシャル[16]を組み込む開発を行う予定である。

OpenMX インターフェイスでの計算条件の設定は、画面上部の設定項目選択部の「Calc」から

「OpenMX」を選んで OpenMX 計算条件設定ダイアログを立ち上げて行う。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。計算条件設定後、「OK」ボタンをクリックすると、OpenMX 入力ファイル保存画面が表示される。ファイル名を指定し「保存」ボタンをクリックすると、cygwin が起動される。そこで、LINUX コマンドにより、OpenMX の計算を実行することができる。

4. 材料設計統合システムを利用した事例紹介

4.1. ブロックコポリマーの粗視化シミュレーション

ここでは、粗視化動力学法の一つである散逸粒子動力学法（DPD 法）でのシミュレーションによる A5B5 ジブロックコポリマーの、マイクロ相分離シミュレーションの例を示す。

モデル化はいたってシンプルであり、マウスクリック操作で、ある 1 つの原子 5 個を一行に並べ、別の原子 5 個をその延長線上に並べ、原子間に結合を作ればよい（図 9）。その際の原子種は何でもよい。後ほど行う、計算条件設定のところで、質量やポテンシャルパラメータを DPD 用のものに置き換えるからである。

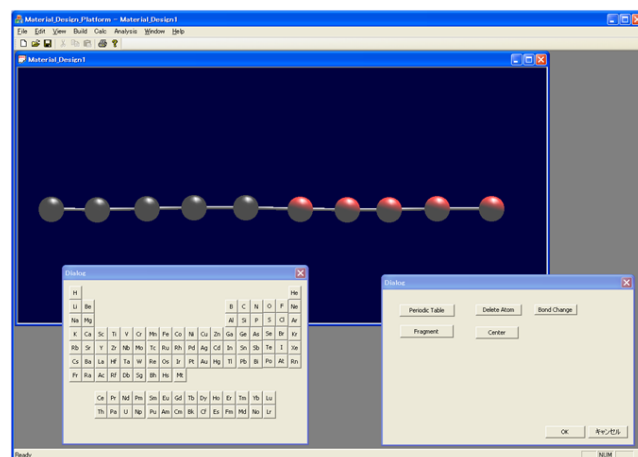


図 9 粗視化モデル構築

OCTA インターフェイスを立ち上げ、高分子数を指定する（図 10）。ここでは、500 を指定した。

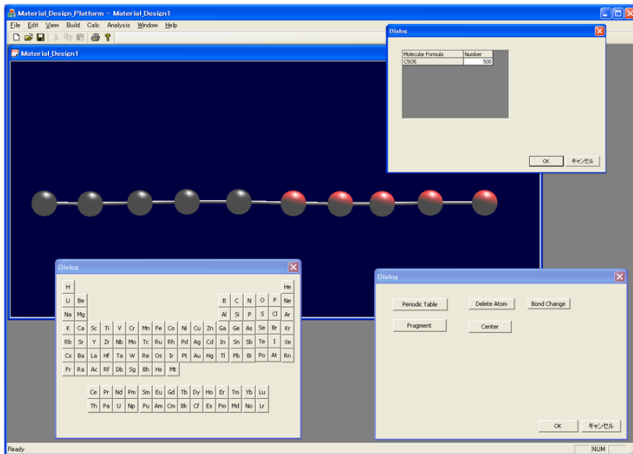


図 10 高分子数の指定

「OK」ボタンをクリックすると、OCTA のグラフィックユーザーインターフェイスである GOURMET が起動される(図 11)。この画面上で、粒子の質量や、粒子間平均距離、DPD のポテンシャルパラメータを指定する。ここで、これらのパラメータの値は、Groot と Madden の論文[17]に記載のパラメータを用いることとした。ちなみに、DPD 法のシミュレーションでは、粒子間平均距離は高分子の持続長程度とされる。

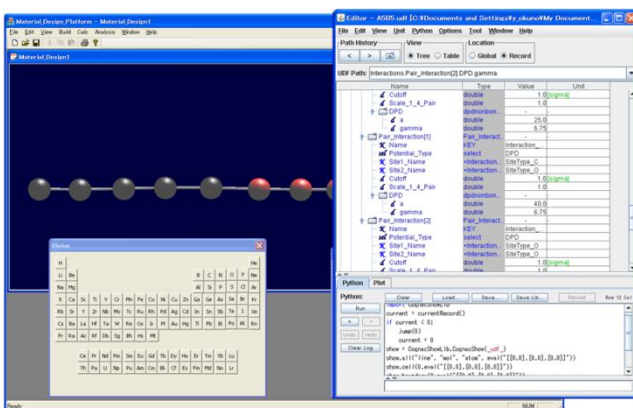


図 11 OCTA の起動と計算条件指定

計算条件 (DPD 法の選択や計算ステップ数等) を指定後、OCTA の DPD 法シミュレーションの計算を、OCTA の動力学法ソルバーである、COGNAC を用いて行った (図 12)。

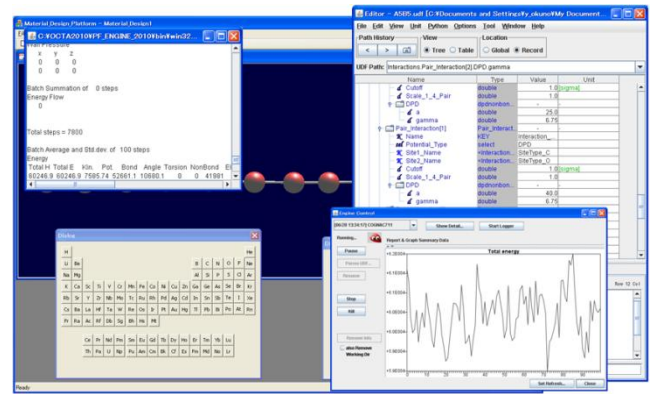


図 12 計算の実行

計算終了後、OCTA のグラフィックユーザーインターフェイスである GOURMET を用いて、解析を行った。図 13 に示すような、明確なラメラ構造を得ることができた。

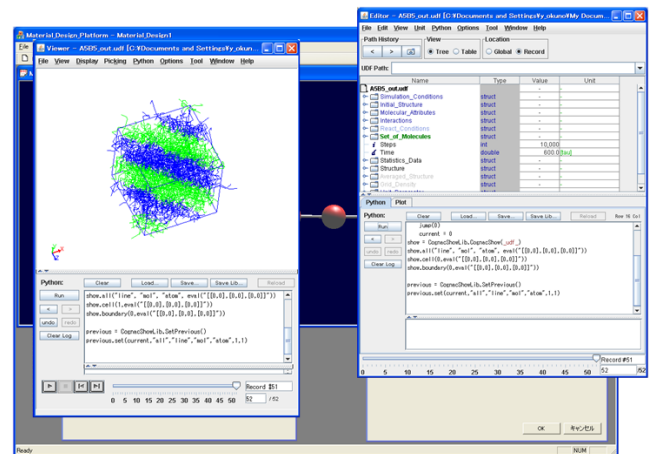


図 13 計算結果の描画

A3B7 ジブロックコポリマーについても、同様にモデル化を行い (図 14)、パラメータの値や分子数等も、全く同じものを用いた DPD シミュレーションを行った。

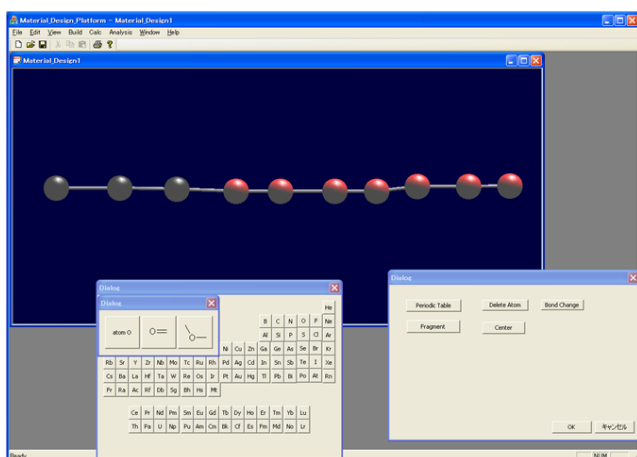


図 14 A3B7 ブロックコポリマーの場合

その結果、A5B5 ジブロックコポリマーの場合と異なり、A3B7 ジブロックコポリマーの場合には、明確な相構造を形成しないことがわかった。

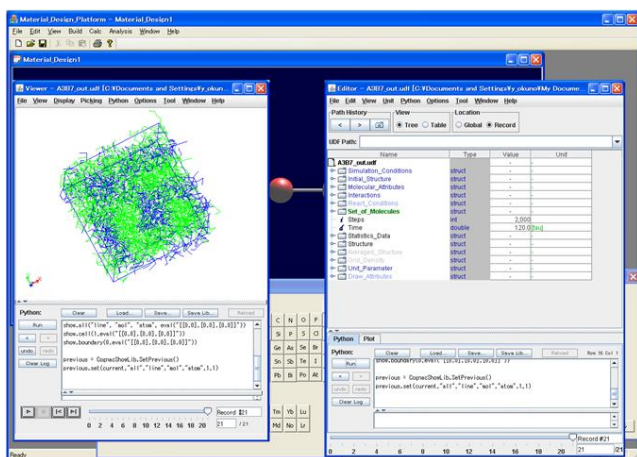


図 15 A3B7 ブロックコポリマーの計算結果

以上のように、材料設計統合システムを用いると、OCTA での DPD 法のシミュレーションにより、相分離構造の解析が、容易に行えることがわかった。

4.2. ADBS による高分子の計算及び OCTA との連携による分子動力学計算

高分子の電子状態計算に関しては、当社が販売しているフラグメント分子軌道計算法[15]プログラム ADBD[16]で行うことができる。ADBD も材料設計統合システムの計算ソルバーであるため、

ADBD で計算したデータを、材料設計統合システムを介して Advance/OCTA の計算に利用することも可能となっている。

実際に、材料設計統合システムを介して、ADBD と Advance/OCTA を連携させて行ったブタジエンポリマーに関するシミュレーションの例を示す。まず、ブタジエンポリマーのモノマーを材料設計統合システムにてマウスクリックで構築した (図 16)。

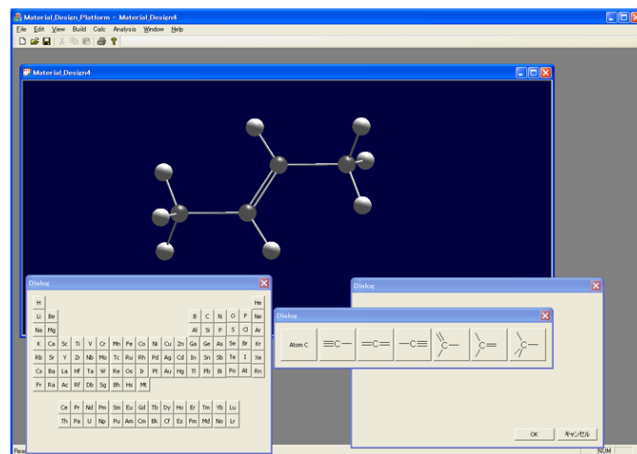


図 16 モノマー構造の構築

Head 原子と Tail 原子をクリックで指定した後、重合度を指定して (図 17)、ブタジエンポリマーを容易に構築できた (図 18)。

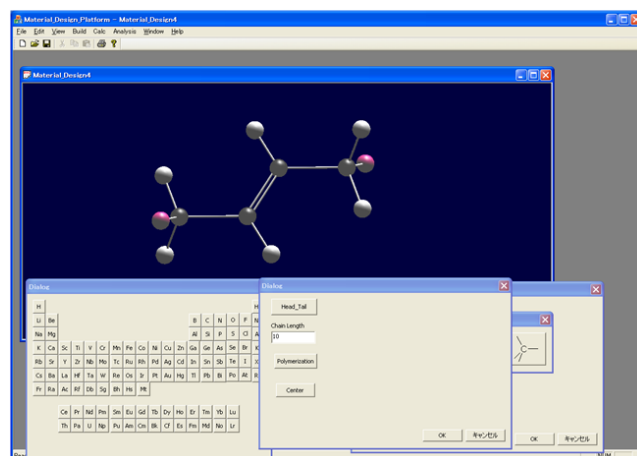


図 17 ヘッド原子とテイル原子の指定

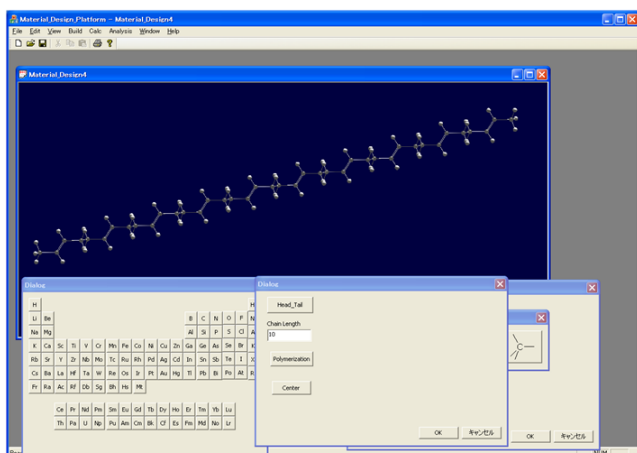


図 18 重合度の指定とポリマーの発生

その構造を入力構造として、ADBD でのフラグメント分子軌道計算を行うための計算条件設定を行った。マウスクリックで FMO チェックボックスを on にするとモノマー単位でフラグメント分割された ADBS 入力ファイルができる (図 19)。

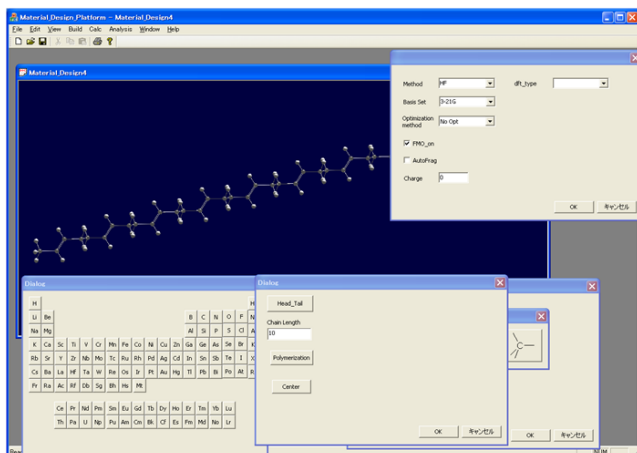


図 19 ADBS の計算条件の指定

「OK」ボタンをクリックして、ADBD の計算を行い、最適化構造と原子電荷を求めた (図 20)。

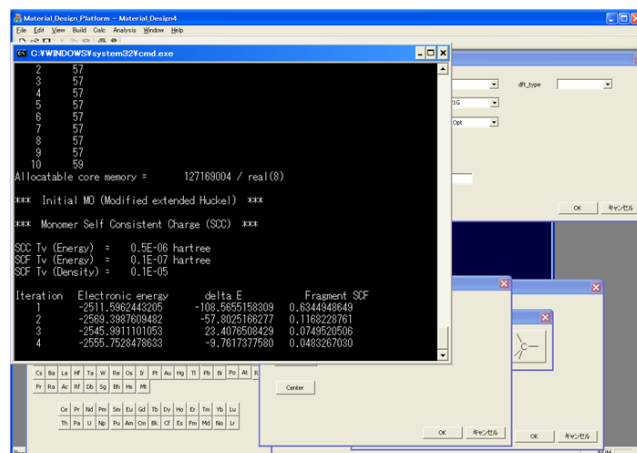


図 20 ADBS の計算の実行

計算終了後、ADBD 出力ファイルから構造を読み込み、最適化構造を表示させた (図 21)。なお、その際、画面上には表示されないが、原子電荷等の情報も自動的に読み込まれている。

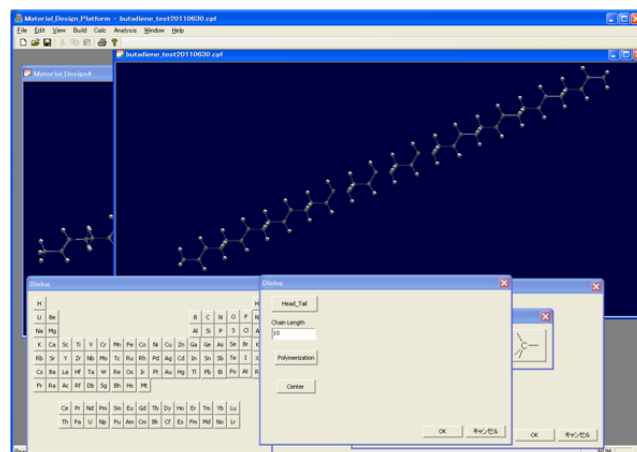


図 21 計算結果である最適化構造の表示

次に、OCTA インターフェイスダイアログを立ち上げ、高分子数を入力して、OCTA のグラフィックユーザーインターフェイス Gourmet を起動し、計算条件を指定して、Advance/OCTA の入力ファイルを構築した。その際、ADBS で計算された電荷が自動的に取り込まれている。また、ポテンシャルは、自動的に Dreiding ポテンシャルに設定されている。そして、分子動力学計算を実行した (図 22)。

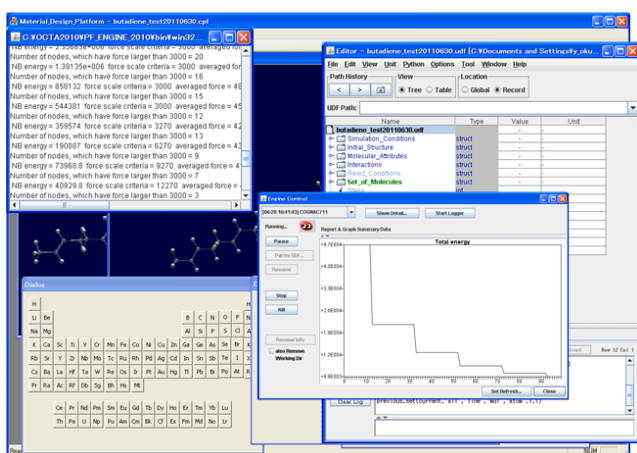


図 22 OCTA の起動と分子動力学計算の実行

計算終了後、計算結果を表示させた (図 23)。材料設計統合システムでブタジエンポリマーモデルを作成し、その構造を入力構造として ADBD で最適化構造と原子電荷を求め、その電荷データを用いて Advance/OCTA で分子動力学計算を行い、ブタジエンポリマーの平衡状態構造を求めることができた。

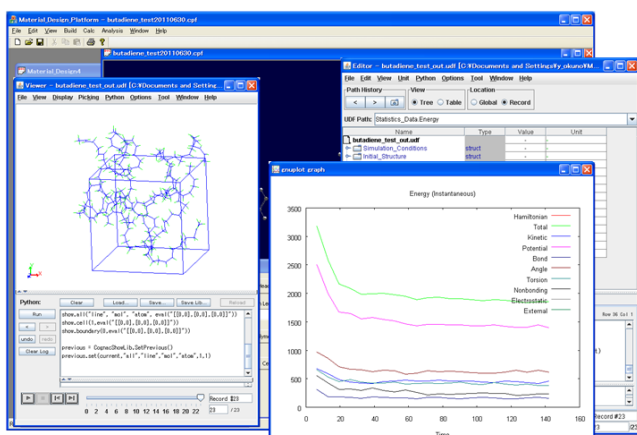


図 23 分子動力学計算結果の解析

同様の方法で、応力-歪み解析、ガス拡散解析、相分離構造の解析、光学特性評価、体積弾性率評価、ガラス転移温度 (T_g) 評価等が可能である。

4.3. OpenMX によるカーボンナノチューブの計算

ここでは、材料設計統合システムによるカーボンナノチューブのバンド計算の実例を紹介する。

材料設計統合システムでの CNT ビルダーを用いれば、簡単にカーボンナノチューブのモデル化ができる。操作法としては、カイラル指数を入力して「OK」ボタンをクリックするだけであり、ここでは、カイラル指数 (6,3) のカーボンナノチューブのモデルを作成した (図 24)。

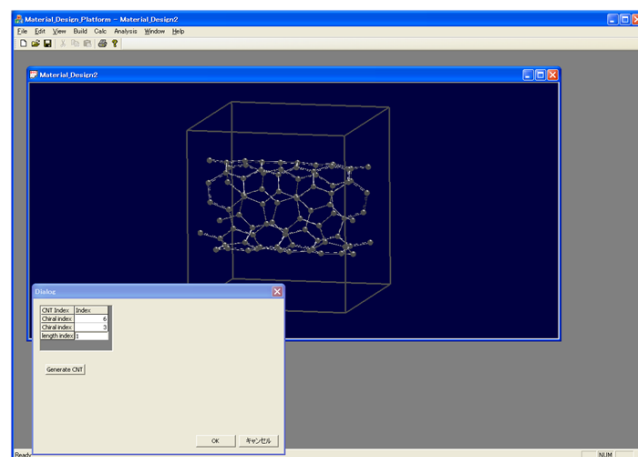


図 24 カイラル指数入力により作成したカーボンナノチューブ構造

カーボンナノチューブ構造作成後、OpenMX の計算条件設定ダイアログを立ち上げ、計算条件を設定した。局在数値基底や擬ポテンシャルの設定、構造最適化条件等を設定した (図 25)。

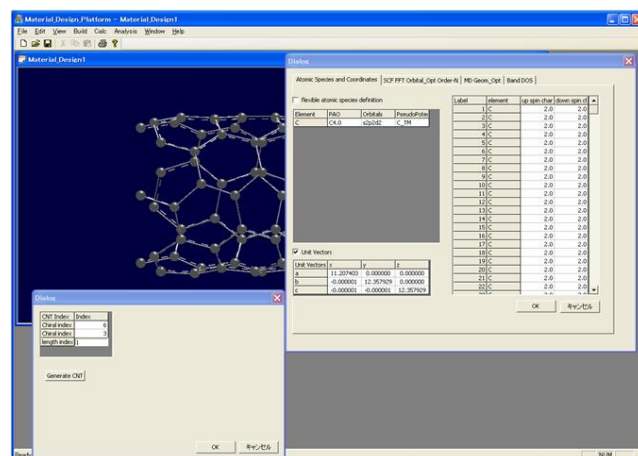


図 25 OpenMX の計算条件の設定

計算条件設定後、「OK」ボタンをクリックして入

力ファイルを保存すると、cygwin 画面が自動的に立ち上がる。そこで、OpenMX のジョブの実行が可能である (図 26)。

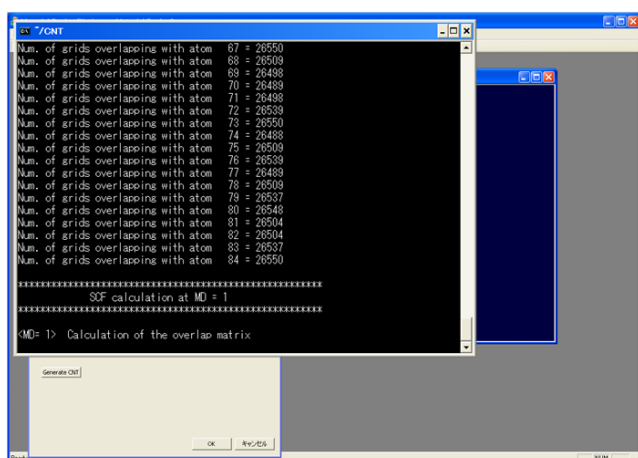


図 26 OpenMX での構造最適化計算の実行

計算終了後、OpenMX 出力ファイルを読み込み、最適化された構造を表示させることができる (図 27)。

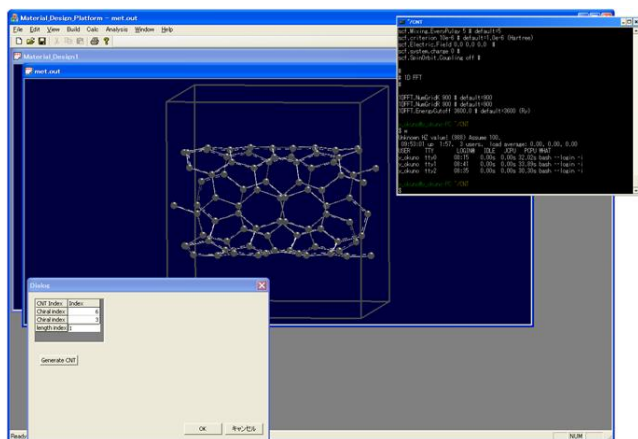


図 27 最適化構造の読み込み

ここでは、さらに、OpenMX の計算条件設定ダイアログを立ち上げ、バンド計算の計算条件設定を行い、バンド計算を実行した。計算終了後、gnuplot による結果解析の結果、図 28 のような、バンド構造が得られ、本カーボンナノチューブが伝導体であることがわかった。

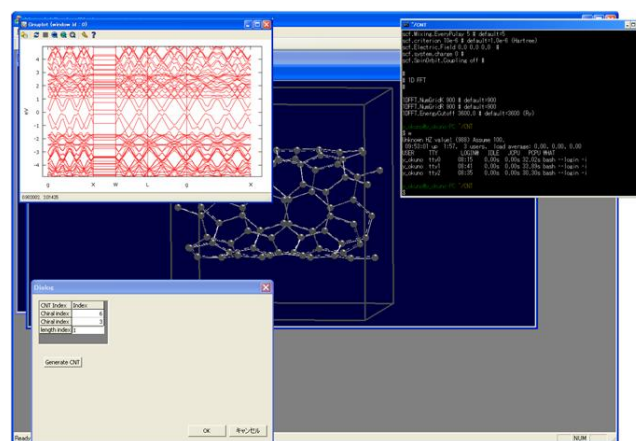


図 28 計算結果の解析

5. まとめ

完成した材料設計統合システムのプロトタイプの特徴やメリット、その操作法などを概観した。材料設計統合システムは、材料設計統合プラットフォームと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実行できるものである。従って、複数のシミュレーション手法を目的に応じて使い分け、または組み合わせた解析を行うことができる。それにより、分子、タンパク質、ポリマー、結晶、固体、液体、気体等、多岐にわたる材料をトータルに解析することが可能となった。実際、材料設計統合システムを利用した解析事例では、その有用性が示された。

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] ADBS,
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
<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] アクセルリス社ホームページ,
<http://accelrys.co.jp/>
- [10] Scienomics home page
<http://www.scienomics.com/>
- [11] Chemical computing group home page,
<http://www.chemcomp.com/>
- [12] K. Kitaura, T. Sawai, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi: Chem. Phys. Lett. 312, 319 (1999).
- [13] COGNAC: T. Aoyagi, F. Sawa, T. Shoji, H. Fukunaga, J. Takimoto, M. Doi, Comput. Phys. Commun., 145, 267 (2002).
- [14] S. L. Mayo, B. D. Olafson, and W. A. Goddard, J. Phys. Chem. 94, 8897 (1990).
- [15] A. K. Rappe, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III, and W. M. Skiff, J. Am. Chem. Soc. 114, 10024 (2002).
- [16] 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).
- [17] R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys. 108 (1998) 8713.