



アドバンスソフト技術セミナー ナノ・バイオシミュレーションの現状と当社の取り組み

ナノからメソ領域のシミュレーションの取り組み

アドバンスソフト株式会社
技術第2部 主任研究員
奥野 好成

3.

セミナーの主な内容

1. ナノからメソ領域のシミュレーションの現状
 - 1-1. Advance/OCTAとは？
 - 1-2. Advance/OCTAの構成
 - 1-3. Advance/OCTAが扱う対象
 - 1-4. 適用事例
2. ナノからメソ領域のシミュレーションの当社の取り組み
 - 2-1. 当社におけるAdvance/OCTAの位置づけ
 - 2-2. 当社が提供しているサービス
 - 2-3. 当社での適用事例
 - 2-4. 材料設計統合システムの取り組み



1. ナノからメソ領域のシミュレーションの現状

1-1. Advance/OCTAとは？

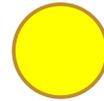
- 大学連携型産業科学技術研究開発プロジェクトにて土井名古屋大学教授(現東大)をリーダーとしてOCTAを開発
- 2006年にOCTAの商用利用の権利をアドバンスソフト株式会社がOCTA管理委員会より取得、Advance/OCTAとしてリリース
- **高分子, コロイド, ゲル, 界面活性剤, 液晶などのソフトマテリアルに対するシミュレータ**

高分子



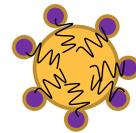
繊維、ゴム、プラスチック、フィルム、生体組織

コロイドゲル



おむつ、塗料、化粧品、バター、牛乳、インク

界面活性剤



石鹸、洗剤、泡、シュービングクリーム

液晶



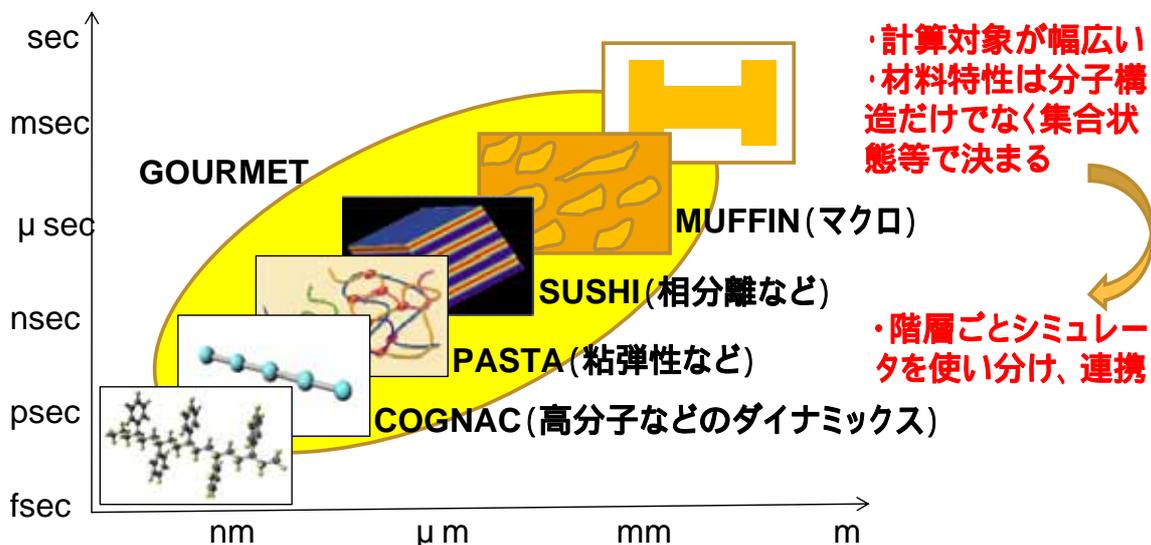
液晶ディスプレイ、液晶シャッター、液晶レンズ



3

1-2. Advance/OCTAの構成

OCTA = グラフィックインターフェースGOURMET + 4つの計算エンジン



・計算対象が幅広い
・材料特性は分子構造だけでなく集合状態等で決まる

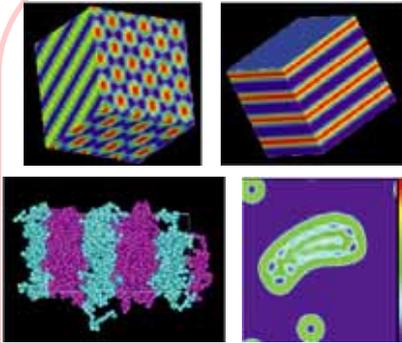
・階層ごとシミュレータを使い分け、連携



4

1-3. Advance/OCTAが扱う対象例

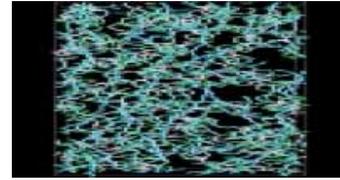
マイクロ相分離構造



OCTA HP(<http://octa.jp/>)より掲載

- ・積層構造と弾性的性質の関係解析
繊維材料
- ・ナノパターン形成解析
レジスト、高密度メモリ
- ・水分保湿に有利な構造予測
化粧品

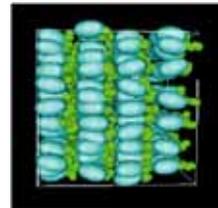
高分子ゲル



OCTA HP
(<http://octa.jp/>)
より掲載

- ・水分吸収機能解析 おむつ、化粧品
- ・体積相転移現象の解析 人工筋肉や
ドラッグデリバリーへの応用

液晶



OCTA HP
(<http://octa.jp/>)
より掲載

- ・電場による構造変化解析
液晶ディスプレイ、液晶レンズ



5

1-4. 適用事例

- 応力 歪み解析：応力 歪み曲線を計算
- ガス拡散解析：拡散係数を計算
- 相分離構造の解析：積層構造を求める。
- 光学特性評価：ポリマー分子の配向を解析
- 体積弾性率評価：圧力変化に伴う体積変化を計算
- ガラス転移温度 (T_g) 評価：高温から一定間隔で温度を下げていき系の体積変化を計算し、体積変化の屈曲点であるガラス転移温度を求める。



6

2. ナノからメソ領域のシミュレーションの当社の取り組み

2-1. 当社におけるAdvance/OCTAの位置づけ

- **量子化学**
 - Advance/ABINIT-MP (分子軌道法)
 - Advance/BioStation (分子軌道法/生体分子)
 - Advance/ProteinDF (密度汎関数法/タンパク質)
- **ナノシミュレーション**
 - Advance/Phase(バンド計算/結晶・表面)
- **構造解析**
 - Advance/FrontSTR(有限要素構造解析)
- **流体解析**
 - Advance/FrontFlow Red
 - Advance/FrontFlow Blue
- **ナノ・メソスケールシミュレーション**
 - Advance/OCTA

当社ソフトウェアの
主なラインアップ

- ・ソルバ部に特化したカスタマイズの提供
- ・アドバンスソフトの既存の商品とリンクの提供



7

2-2. 当社が提供しているサービス

- **ナノ・メソ領域のシミュレーションの受託解析**
材料解析、粗視化ポテンシャルの作成等
- **ナノ・メソの材料系ソフトの利用に関するコンサルティング**
メソシミュレーション、量子化学計算、分子動力学計算、モンテカルロ計算
- **Advance/OCTAのサポートサービス**
(2006年にOCTAの商用利用の権利をOCTA管理委員会より取得)
- **ナノ・メソ領域の材料系ソフトのカスタマイズ**
OCTAのソルバ部に特化したカスタマイズの提供、アドバンスソフトの既存の商品とリンクの提供、Advance/OCTAおよび個別カスタマイズの購入をされたお客様に、Q&Aを中心にしたサポートの提供



8

2-3. 当社での適用事例

溶媒蒸発の解析: 溶媒の蒸発速度をシミュレーションで解析

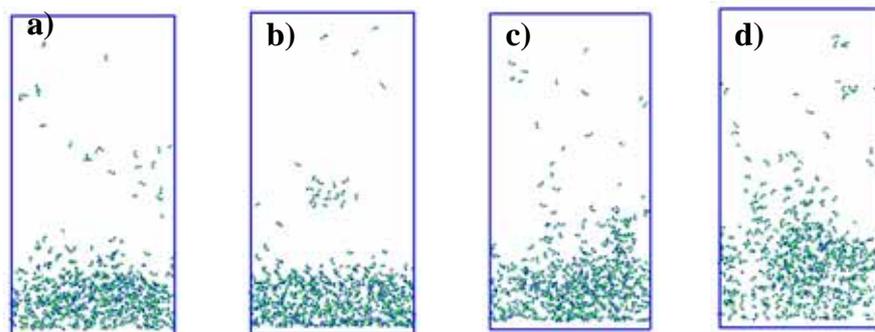
透過膜解析: 多孔質の基質に高分子をグラフトさせた時の細孔の大きさをシミュレーションで評価し、グラフトポリマーが膜の透過性に与える影響を解析

電界紡糸シミュレーション: 電場印加により発生する電荷とポリマーと溶媒からなる系に対して、電場が電荷に与える力を外場として与えた後、動力学シミュレーションを実行



9

電場印加時の溶媒蒸発

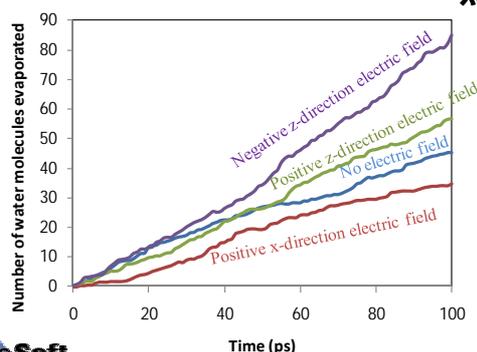


電場印加方向

蒸発抑制

蒸発促進

蒸発促進

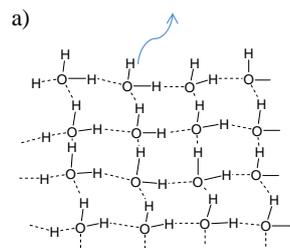


溶媒蒸発数の時間発展

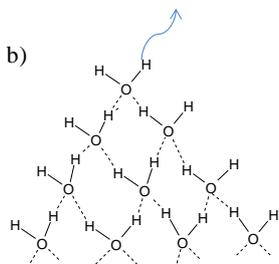
<参考文献> Y. Okuno, M. Minagawa, H. Matsumoto, A. Tanioka, *J. Mol. Struct. THOECHEM*, **2009**, 904, pp.83-90.



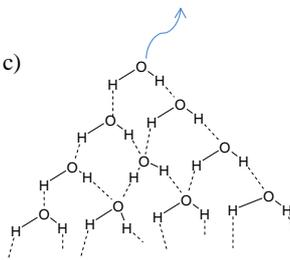
10



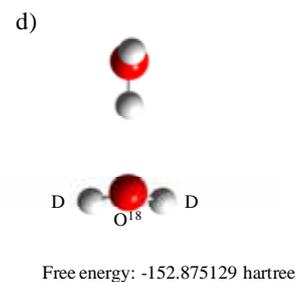
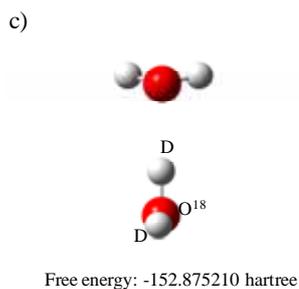
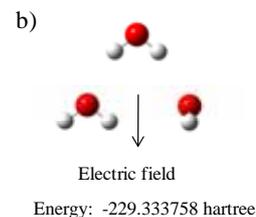
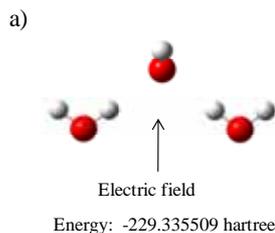
Electric field



Electric field

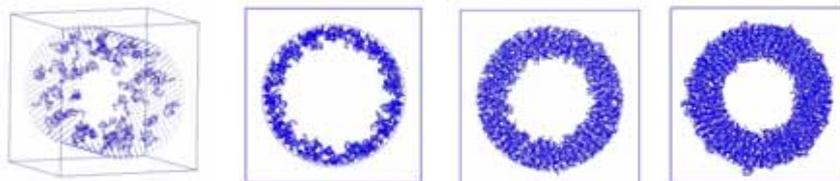


Electric field

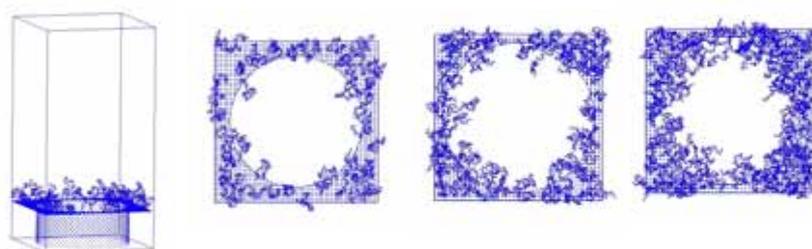


透過膜中のグラフトポリマーの解析

透過膜細孔内部にグラフトされた場合



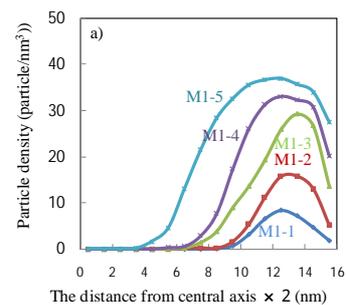
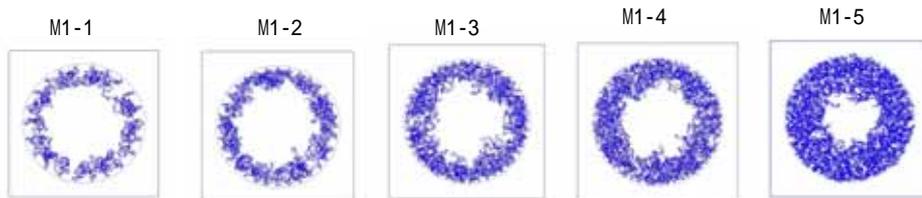
透過膜細孔出入り口にグラフトされた場合



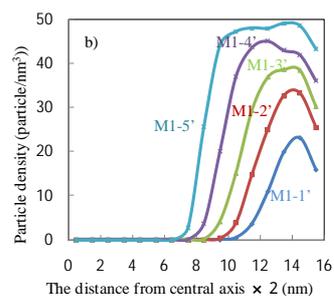
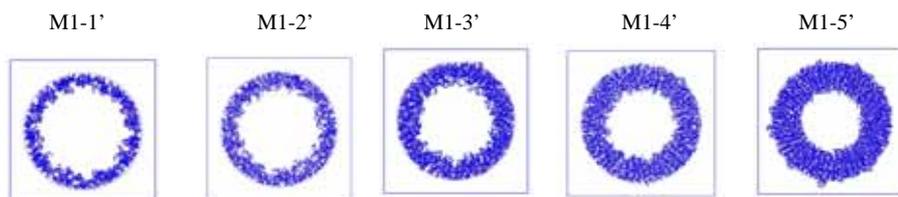
< 参考文献 > Y. Okuno, S. Zhang, K. Saito, H. Matsumoto, M. Minagawa, and A. Tanioka, submitted.



分子量大、グラフト密度小



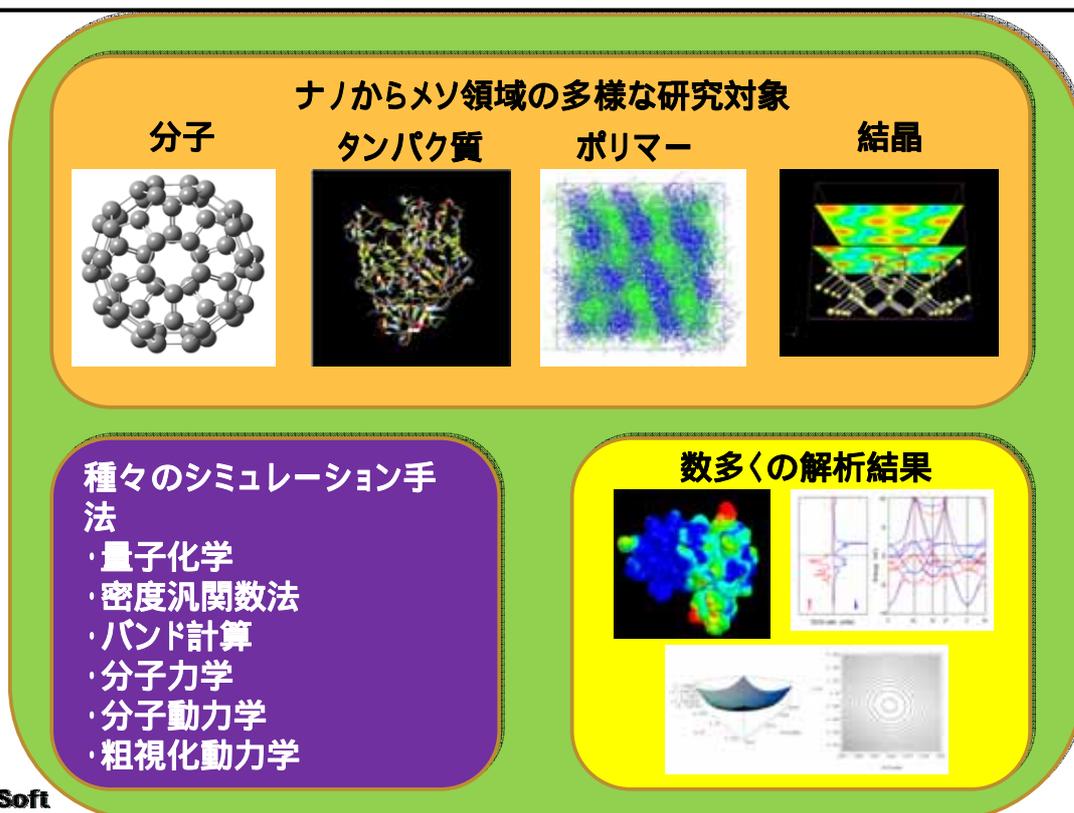
分子量小、グラフト密度大



細孔中心からの距離
と粒子密度の関係



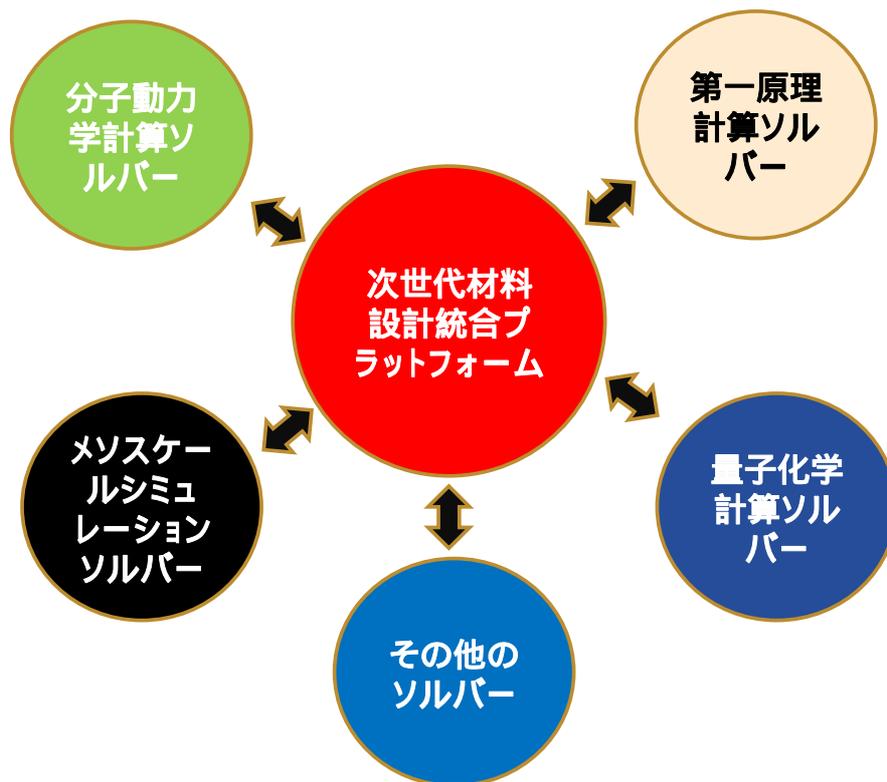
2-4.材料設計統合システムの一取り組み



一つの統合システムであらゆる解析を容易かつ高速に行う

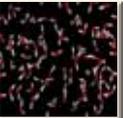
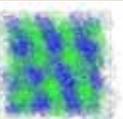


開発する材料設計支援システム:全体像



15

開発する材料設計支援システム:想定ソルバー

計算手法	イメージ図	ソフトウェア名【開発元】	概要
量子化学計算		ADBS 【文科省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト、文科省ITプログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> ・フラグメント分子軌道法を実装したソフトウェア。 ・低分子のみならず生体高分子等の巨大分子系も対象。 ・分子をフラグメントと呼ばれる小さな原子団に分割して分子軌道計算を行い、結果を加え合わせ、巨大分子の計算を行える。
分子動力学計算		ソルバー候補を検討中	<ul style="list-style-type: none"> ・分子、溶液、アモルファス等の分子動力学計算
第一原理計算		PHASE 【文科省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト、文科省ITプログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> ・電子材料・触媒等の密度汎関数法を用いた平面波-擬ポテンシャル第一原理計算プログラム。CASTEPやVASPと同等の機能。 ・電子状態計算・構造最適化等が可能。 ・高い並列化率とベクトル化率を実現している。
メソスケールシミュレーション		OCTA 【経産省・NEDO「高性能材料設計プラットフォームの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> ・ポリマー等のソフトマテリアルの計算を行うソフトウェア。 ・空間スケールごとに異なる計算理論に基づいた複数プログラムで構成され、一つのプラットフォームで統合化されている。
大規模密度汎関数計算		ソルバー候補を検討中	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノスケールの物質群の物性計算のための大規模密度汎関数計算

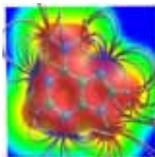


16

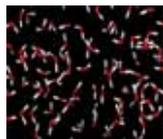
開発する材料設計支援システム：開発部分詳細

●ビジュアライザの機能

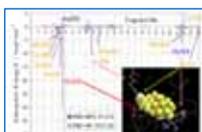
- 分子軌道図、電子密度分布等の表示



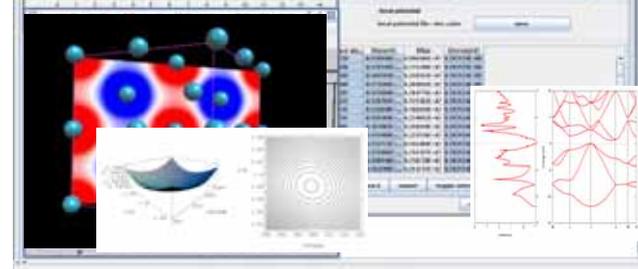
➢ダイナミックスの動画表示



➢グラフ・チャート等の表示(スペクトル表示等)



次世代材料設計統合プラットフォーム



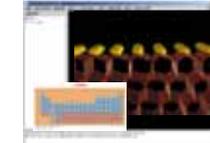
次世代材料設計統合プラットフォームは、分子・溶液・固体・ポリマー・タンパク質等の3次元構造の作成を担うビルダー、電子密度分布図やダイナミックスの動的表示等の結果解析を担うビジュアライザ、シミュレーションソルバーへの入出力やジョブ管理を担うインターフェースから構成される。

●ビルダーの機能

- 分子構造作成、ポリマー構造作成、アモルファス構造作成



➢結晶構造作成、表面・層・スラブ構造の作成



●インターフェースの機能

➢実行中の計算の管理



➢一括計算を多数サーバで同時処理



➢ソルバー番への入出力インターフェース

