

新製品 材料設計統合システム(AMDS)を 利用した事例紹介

アドバンスソフト株式会社
技術第2部 第1課 課長 奥野 好成

発表内容

- 1. 材料設計統合システムについて
 - 1-1. 概要
 - 1-2. 計算ソルバー
 - 1-3. 全体像
 - 1-4. メリット
- 2. 材料設計統合プラットフォームの概要
- 3. 材料設計統合システムを利用した事例紹介
 - 3-1. ブロックコポリマーの粗視化シミュレーション
 - 3-2. 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
 - 3-3. OpenMXによるカーボンナノチューブの計算

1. 材料設計統合システムについて

1-1. 概要

材料設計統合システムの狙い

材料設計シミュレーションの現状

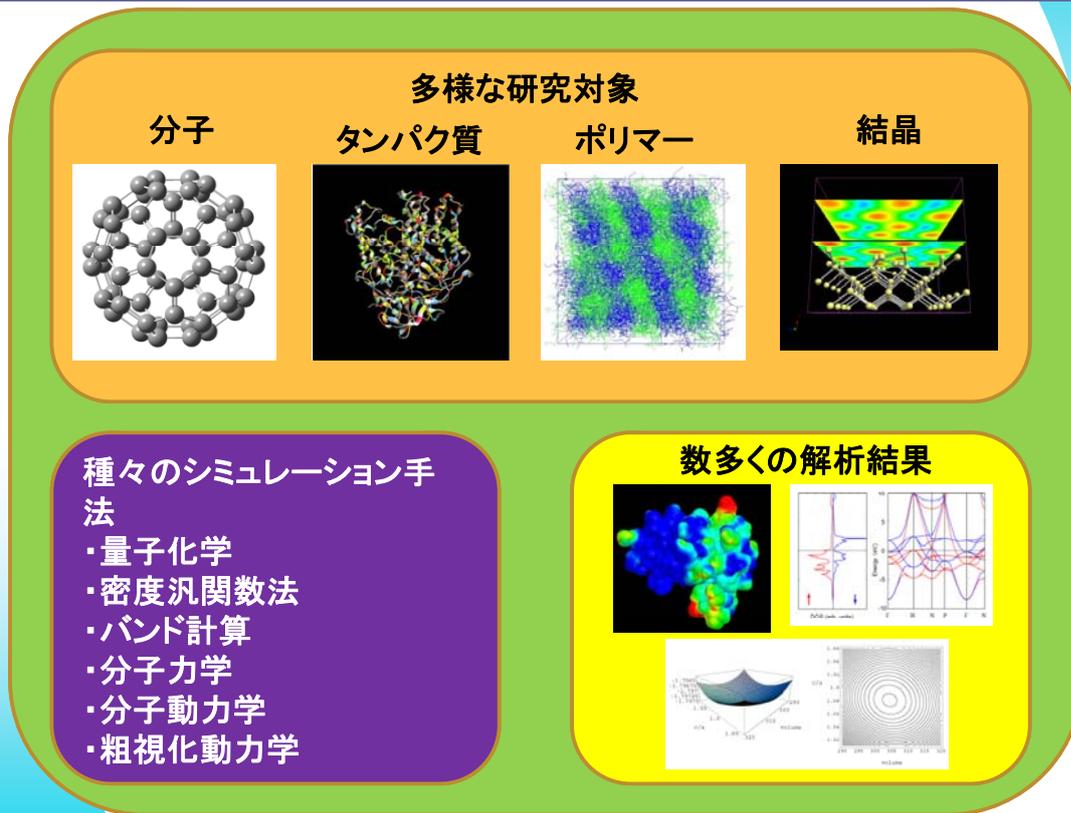
- ・ 我が国での個別のシミュレーションソフトは世界トップレベル
- ・ しかし、統合システム構築で出遅れている。
- ・ よって、材料科学技術分野での競争力低下の危機にある。

次世代材料設計支援システム開発が望まれる。

次世代材料設計支援システム開発の狙い

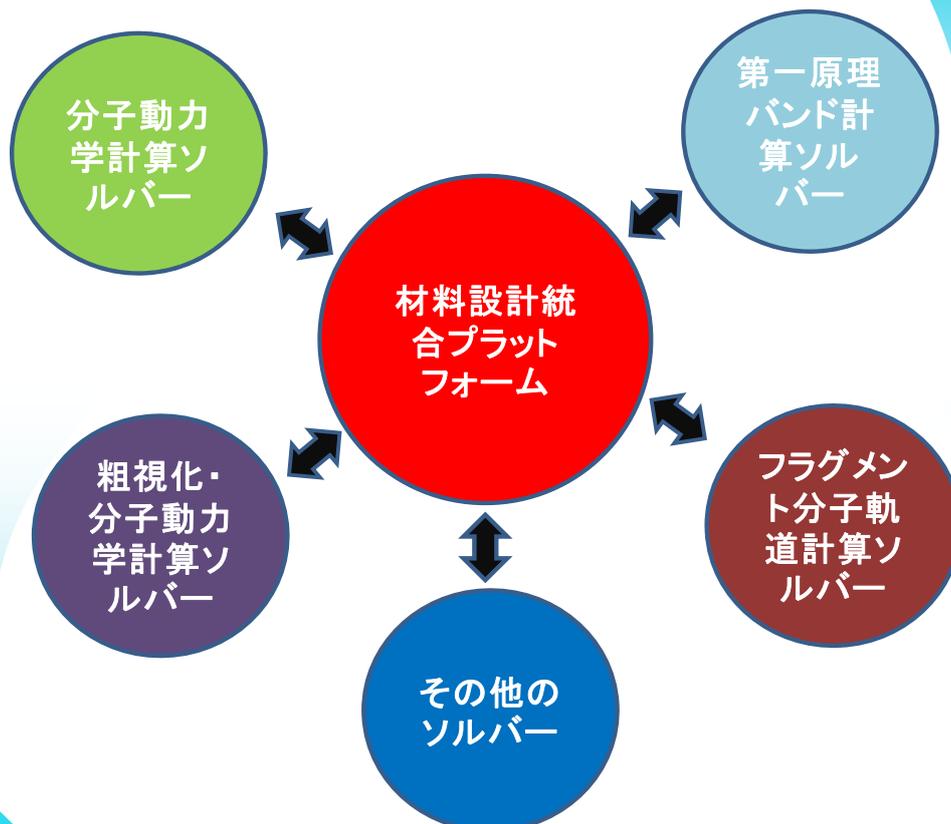
- ・ 種々のシミュレーションソフトを統合的に利用可能に！
- ・ 純国産の統合システム構築
- ・ 機能材料、生体物質、エネルギー利用材料の研究開発に貢献

材料設計統合システムの思想



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

材料設計統合システムの模式図

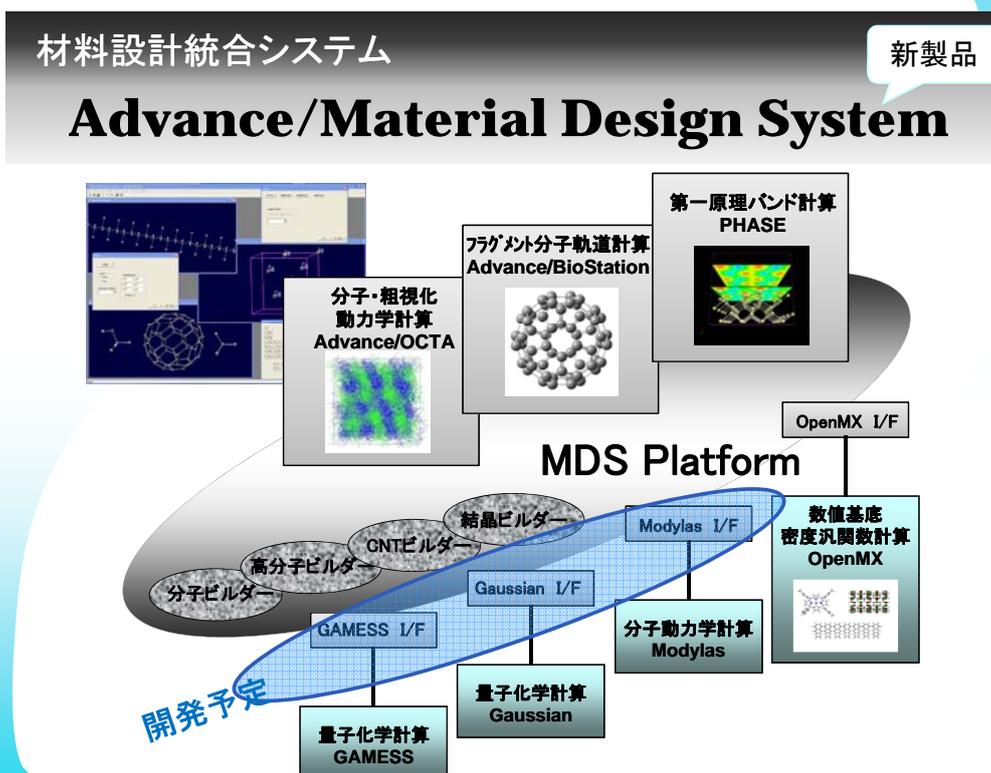


1-2. 計算ソルバー

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

7

1-3. 全体像



8

1-4. メリット

- 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。AMDSではマウスクリック操作で作成可能。
- OpenMX用のビルダー・インターフェース: 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。AMDSではマウスクリック操作で可能。
- ADBSのFMO計算と分子動力学計算による高分子のトータル解析: FMOの電荷計算結果をそのままOCTAの電荷データに利用可能。

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係する解析可能。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。ハ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。

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ファイル形式の読込によるブラベー格子での結晶構造表示機能、ブラベー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ポテンシャル等の分子動力学パラメータ自動設定

11

画面構成

設定項目の選択

回転・拡大・
移動・分子描画

The screenshot displays the Material Design Platform interface. It features a central 3D viewer showing a carbon nanotube structure. Several dialog boxes are overlaid on the interface, including a periodic table for element selection, a dialog for bond changes, and a dialog for setting lattice parameters (a, b, c, alpha, beta, gamma). The interface includes standard menu options like File, Edit, View, Build, Calc, Analysis, Window, and Help.

回転・拡大・
移動・分子描画

12

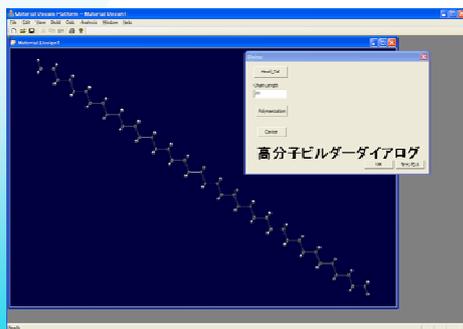
分子ビルダー



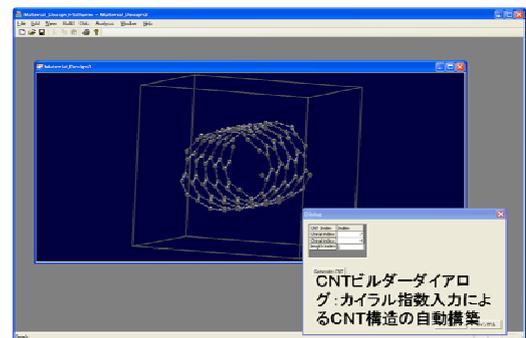
結晶ビルダー



高分子ビルダー

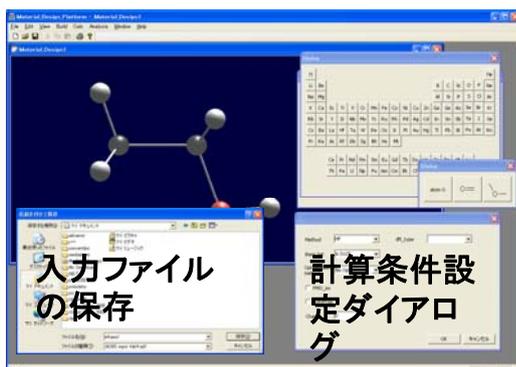


CNTビルダー

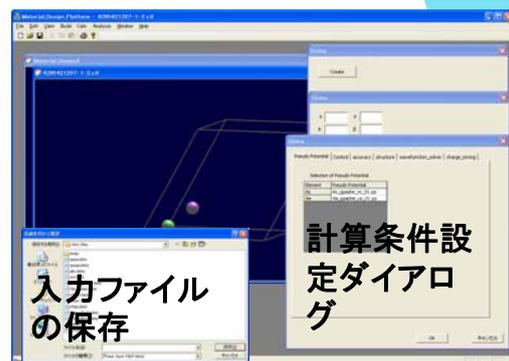


13

ADBS



Advance/PHASE



Advance/OCTA



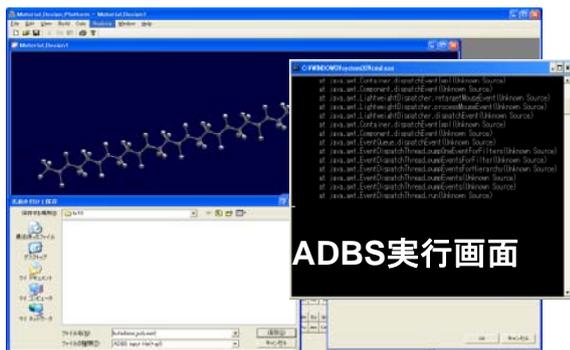
OpenMX



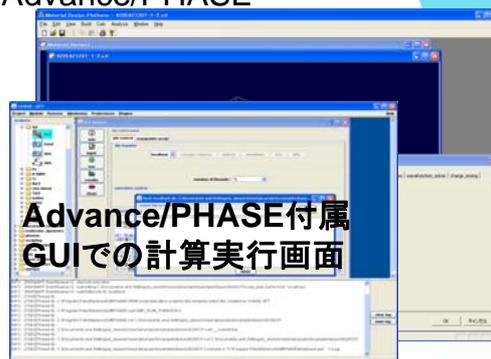
14

インターフェース: 計算の実行

ADBS



Advance/PHASE



Advance/OCTA



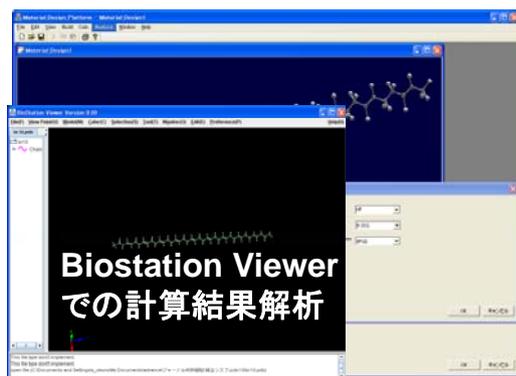
OpenMX



15

インターフェース: 計算結果解析

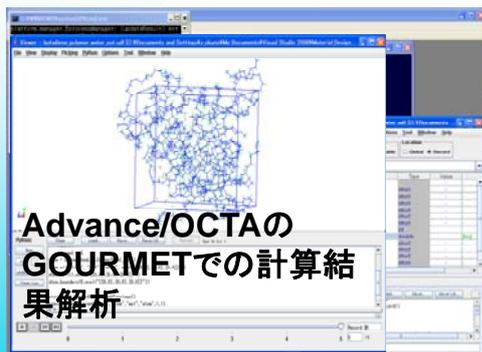
ADBS



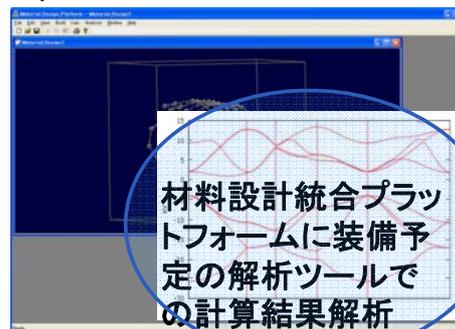
Advance/PHASE



Advance/OCTA



OpenMX



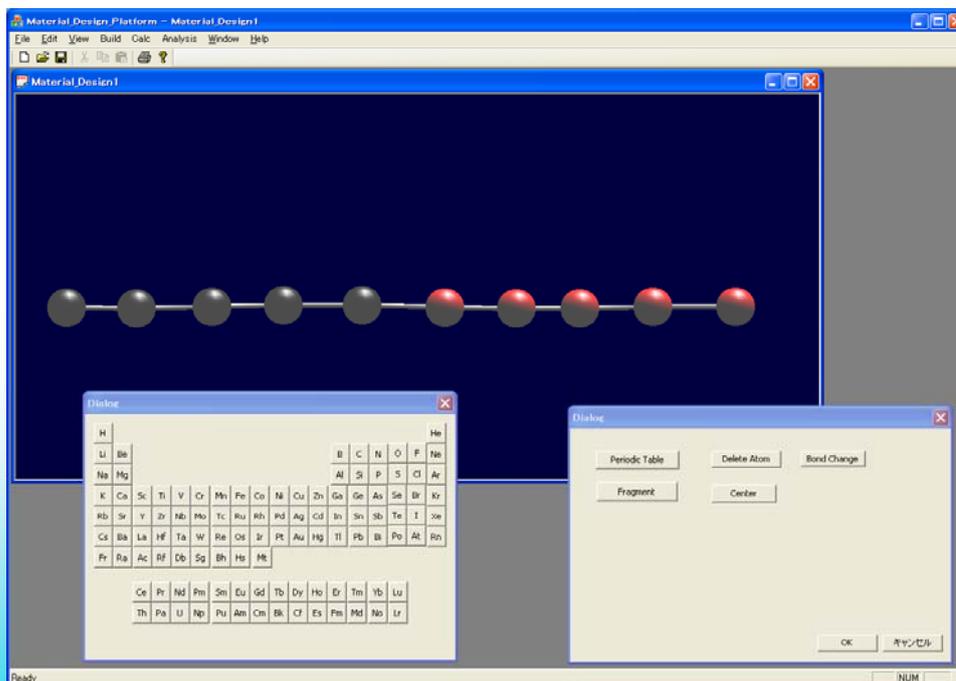
開発中

16

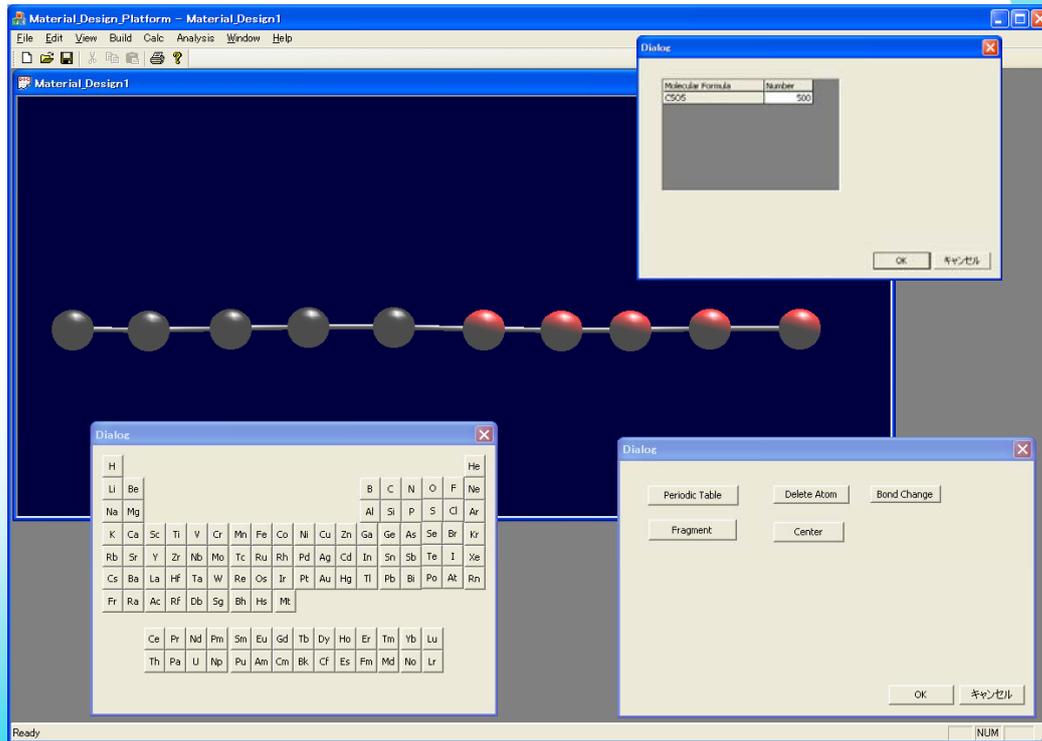
3. 材料設計統合システムを利用した事例紹介

3-1. ブロックコポリマーの粗視化シミュレーション

粗視化モデル構築 粗視化粒子、粒子間距離は高分子の持続長

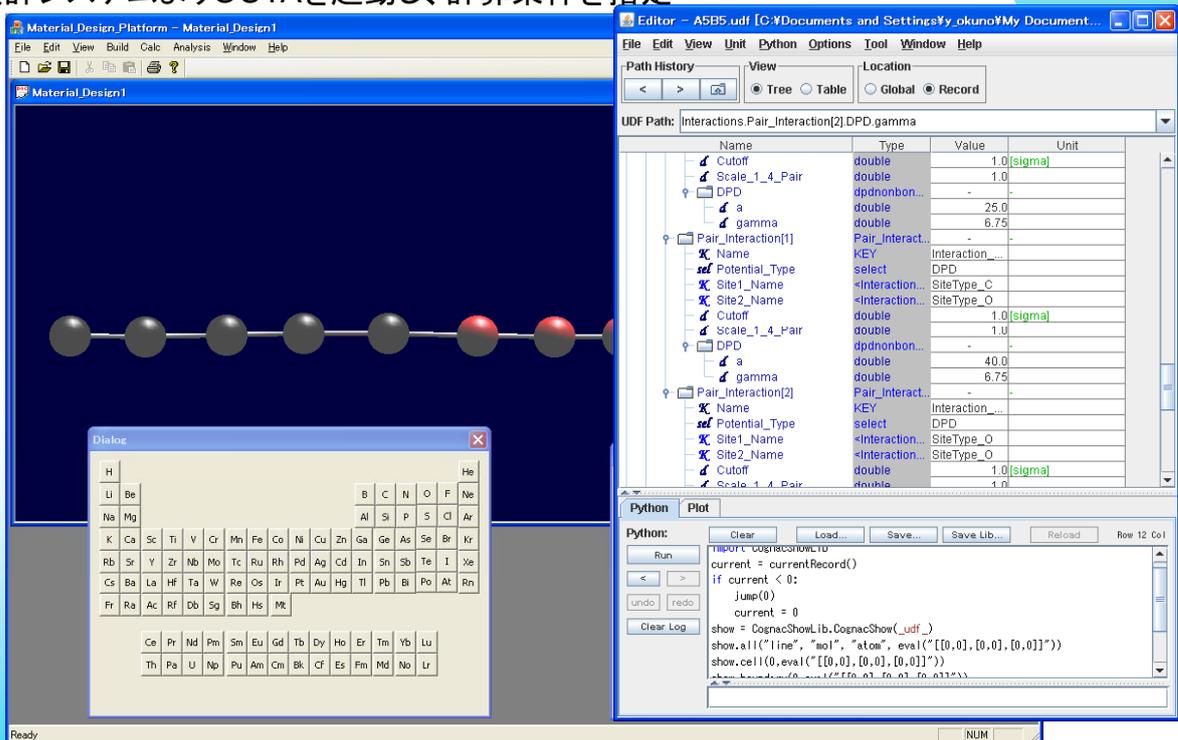


高分子数指定



19

材料設計システムよりOCTAを起動し、計算条件を指定



ポテンシャルの指定等

20

計算の実行

The screenshot displays the 'Material Design Platform' interface during a simulation. On the left, a terminal window shows the following output:

```

main pressure
x y z
0 0 0
0 0 0

Batch Summation of 0 steps
Energy Flow
0

Total steps = 7800

Batch Average and Std.dev. of 100 steps
Energy
Total H Total E Kin. Pot. Bond Angle Torsion NonBond E
80246.9 80246.9 7585.74 52861.1 10680.1 0 0 41981
    
```

Below the terminal is a periodic table. On the right, the 'Editor' window shows a tree view of simulation parameters and a table of values:

Name	Type	Value	Unit
Cutoff	double	1.0	[sigma]
Scale_1_4_Pair	double	1.0	
DPD	dpdnonbon...	-	
a	double	25.0	
gamma	double	6.75	
Pair_Interaction[1]	Pair_Interact...	-	
Name	KEY	Interaction...	
Potential_Type	select	DPD	
Site1_Name	<Interaction...	SiteType_C	
Site2_Name	<Interaction...	SiteType_O	
Cutoff	double	1.0	[sigma]
Scale_1_4_Pair	double	1.0	
DPD	dpdnonbon...	-	
a	double	40.0	
gamma	double	6.75	

At the bottom right, the 'Engine Control' window shows a graph titled 'Total energy' with a y-axis ranging from +5.9E004 to +6.2E004 and an x-axis from 0 to 50. The graph shows a fluctuating energy profile.

21

計算結果の描画

The screenshot shows the 'Material Design Platform' interface displaying the simulation results. The main window shows a 3D visualization of a block copolymer structure, represented by a complex network of blue and green lines within a wireframe box. Below the visualization is a Python console with the following code:

```

Python:
Run
show.all("line", "mol", "atom", eval("[0.0], [0.0], [0.0]"))
show.cell(1, eval("[0.0], [0.0], [0.0]"))
show.boundary(0, eval("[0.0], [0.0], [0.0]"))

previous = CognacShowLib.SetPrevious()
previous.set(current, "all", "line", "mol", "atom", 1.1)
    
```

On the right, the 'Editor' window shows a tree view of simulation parameters and a table of values:

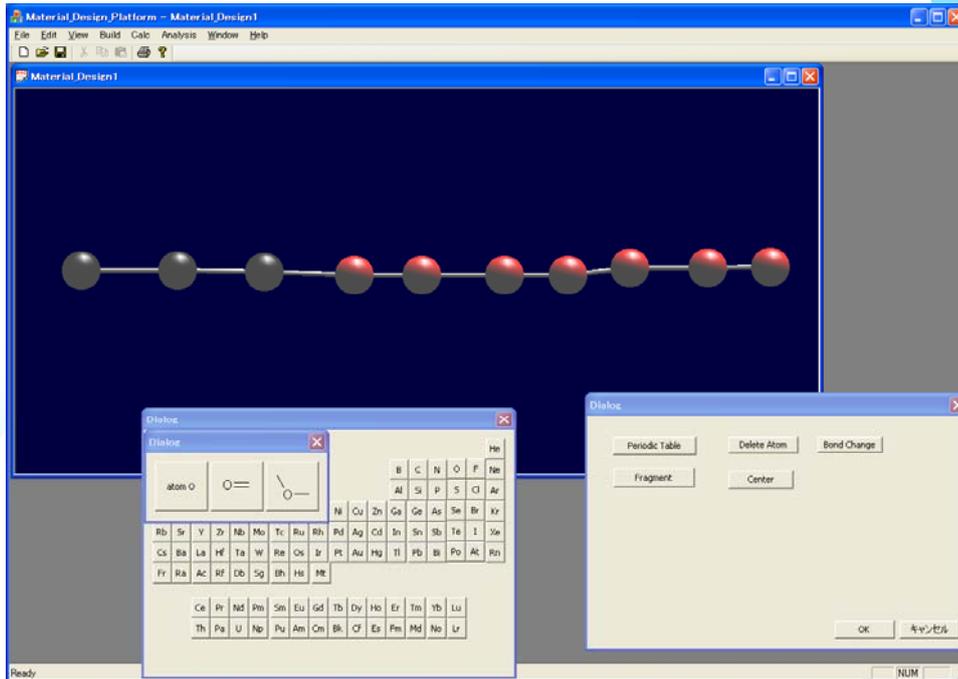
Name	Type	Value	Unit
ASBS_out.udf	struct	-	
Simulation_Conditions	struct	-	
Initial_Structure	struct	-	
Molecular_Attributes	struct	-	
Interactions	struct	-	
Read_Conditions	struct	-	
Set_of_Molecules	struct	-	
Steps	int	10,000	
Time	double	600.0	[hour]
Statistics_Data	struct	-	
Structure	struct	-	
Average_Structure	struct	-	
Unit_Density	struct	-	

At the bottom right, the 'Python Plot' window shows a graph with a y-axis from 0 to 52 and an x-axis from 0 to 52. The graph shows a single data point at (52, 52).

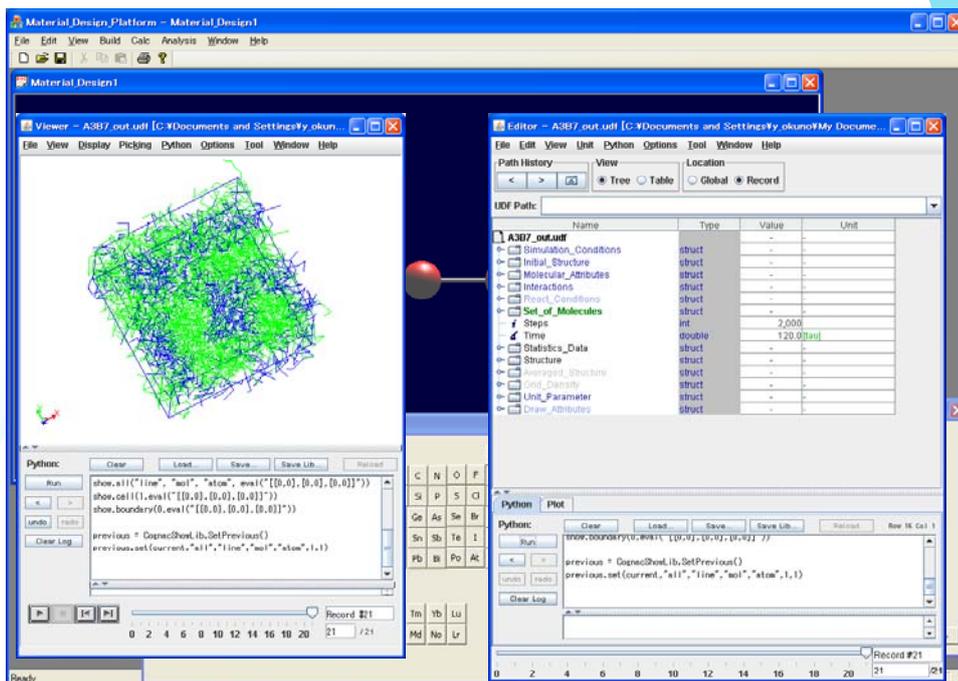
ラメラ構造

22

A3B7ブロックコポリマーの場合



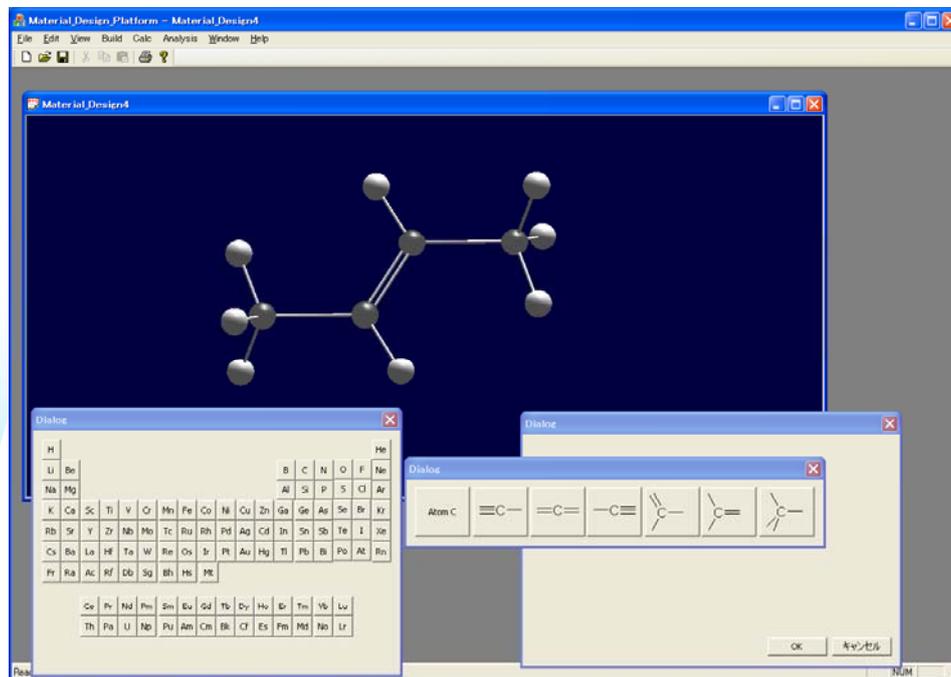
23



A3B7の場合は、ラメラ構造でない。

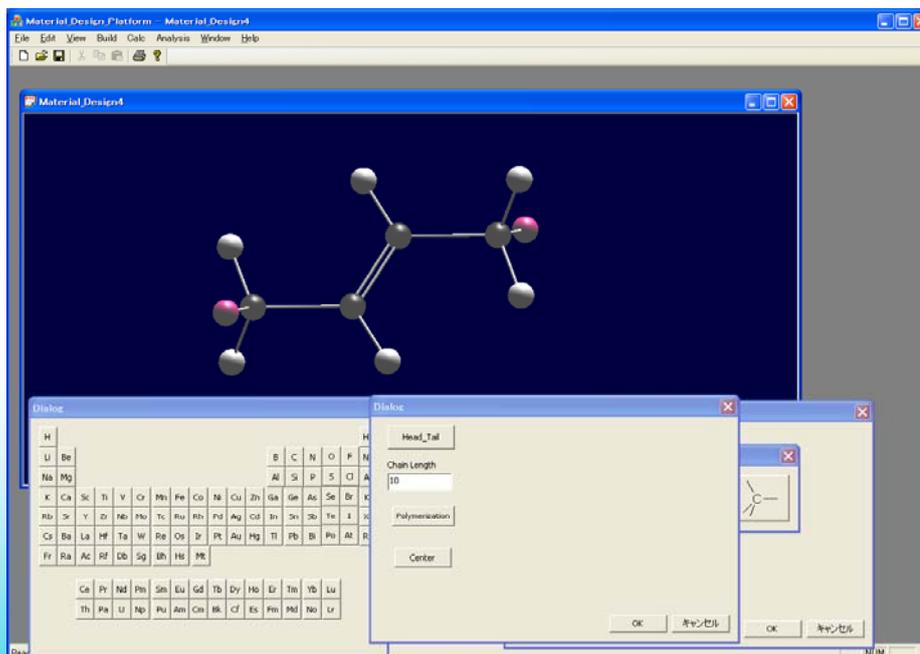
24

モノマー構造の構築



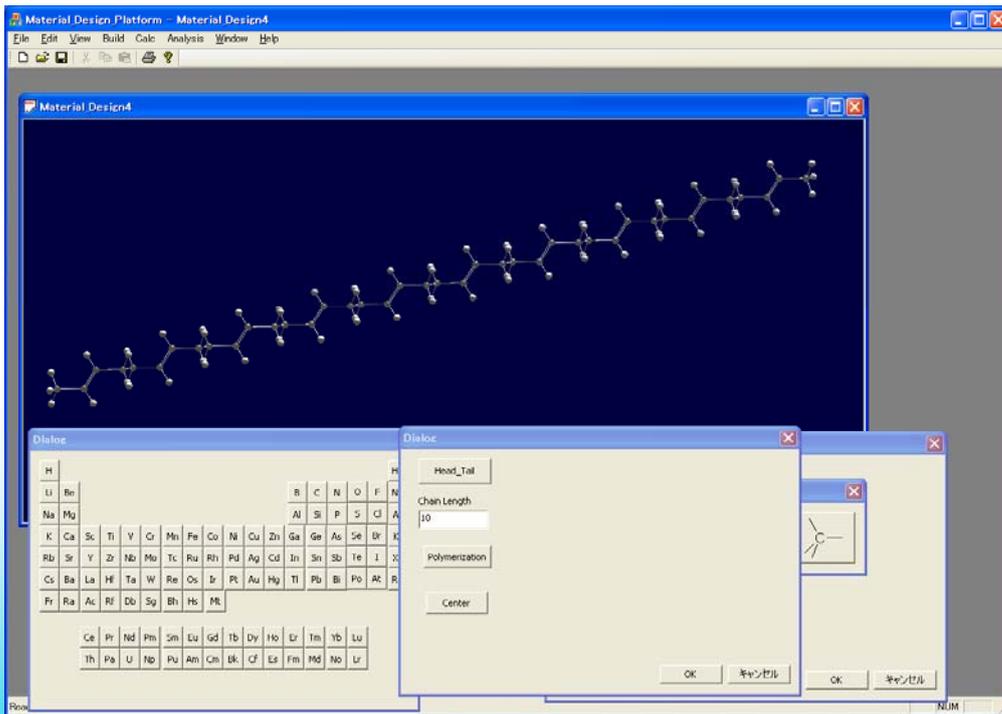
25

ヘッド原子とテイル原子の指定



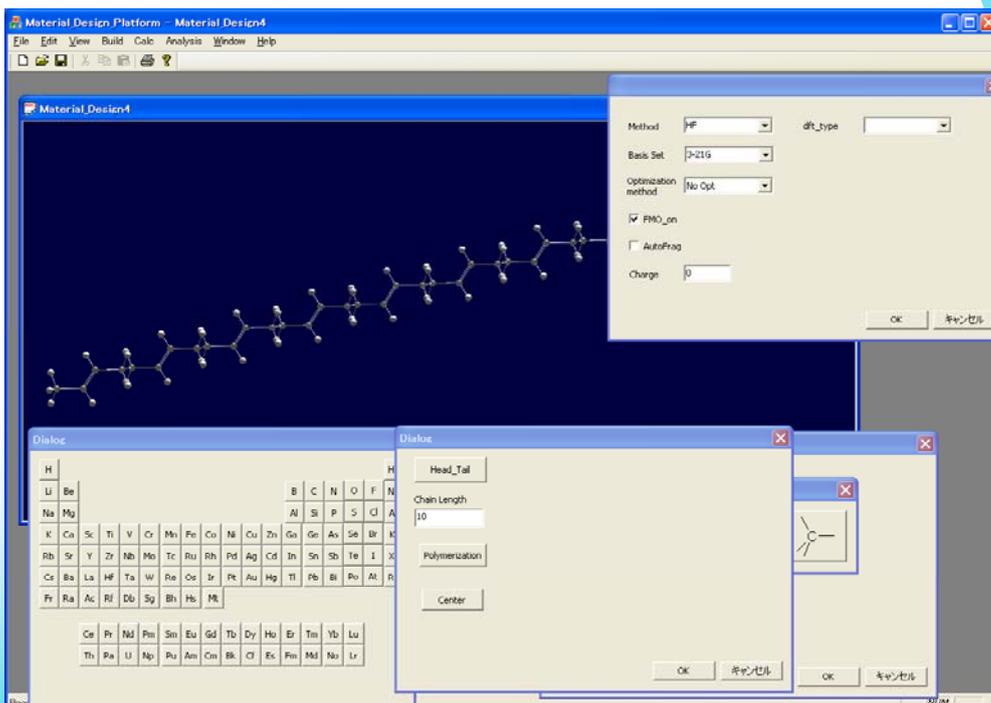
26

重合度を指定し、ポリマーを発生



27

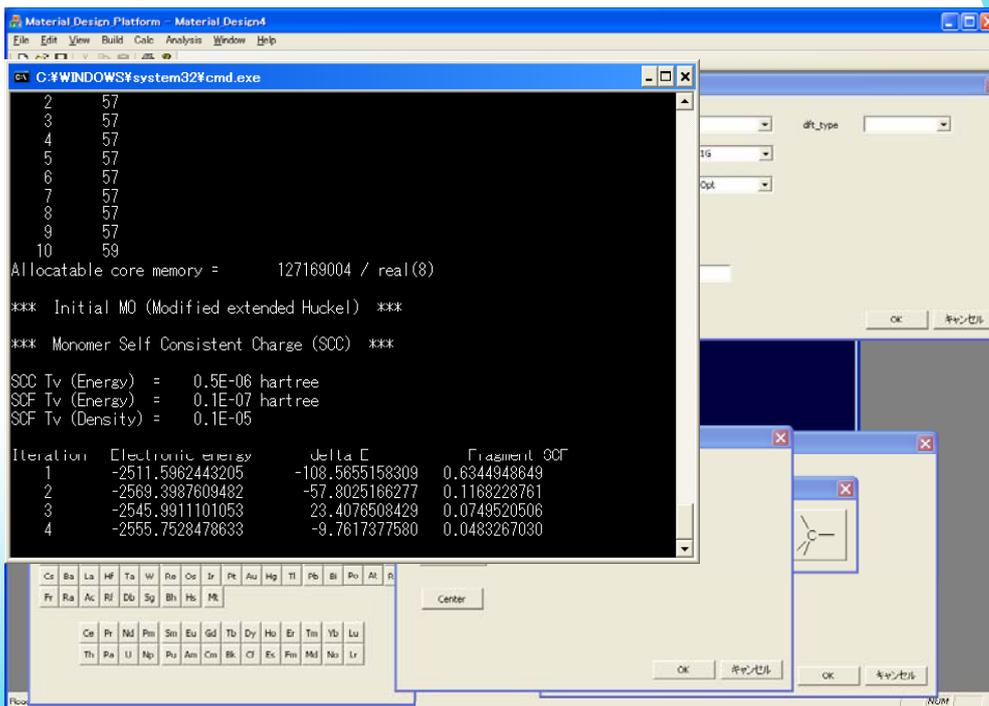
ADBSの計算条件を指定



FMO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。

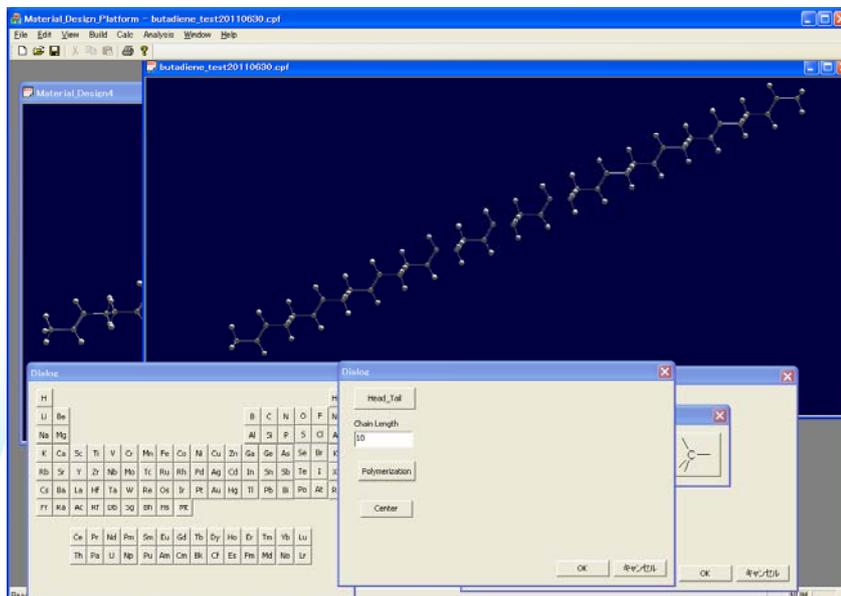
28

ADBSの計算を実行

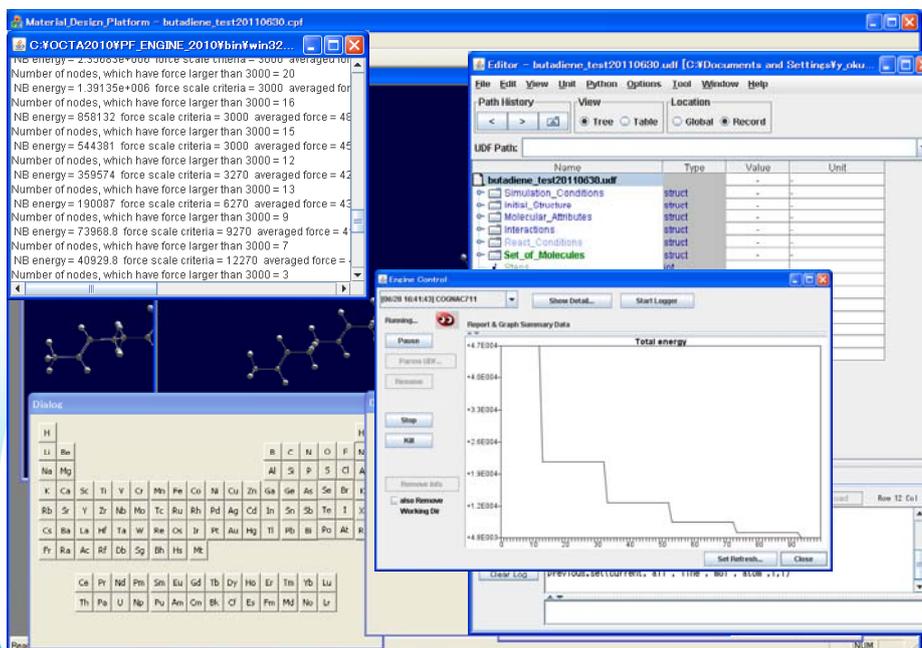


FMOをonにするとモノマー単位でフラグメント分割されたADBS入力ファイルができる。

計算結果の読み込みと構造表示。原子電荷等の情報も読み込む。

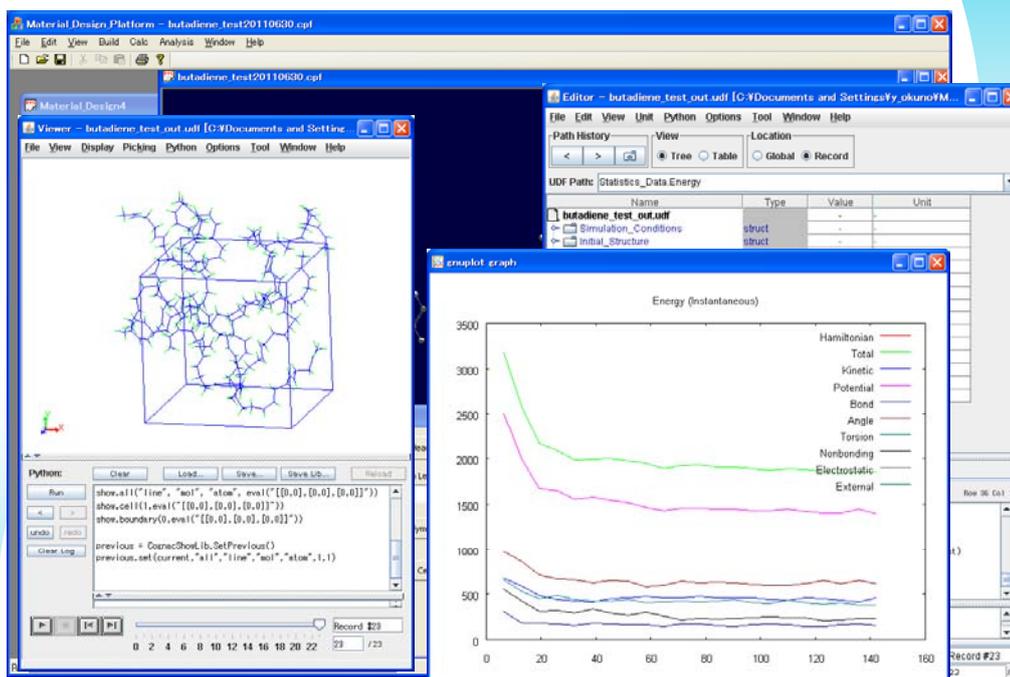


OCTAを起動し分子動力学計算を実行。ADBSで計算した原子電荷をOCTAの入力ファイルに取り込んでいる。ポテンシャルは、自動的にDreidingポテンシャルに設定。



31

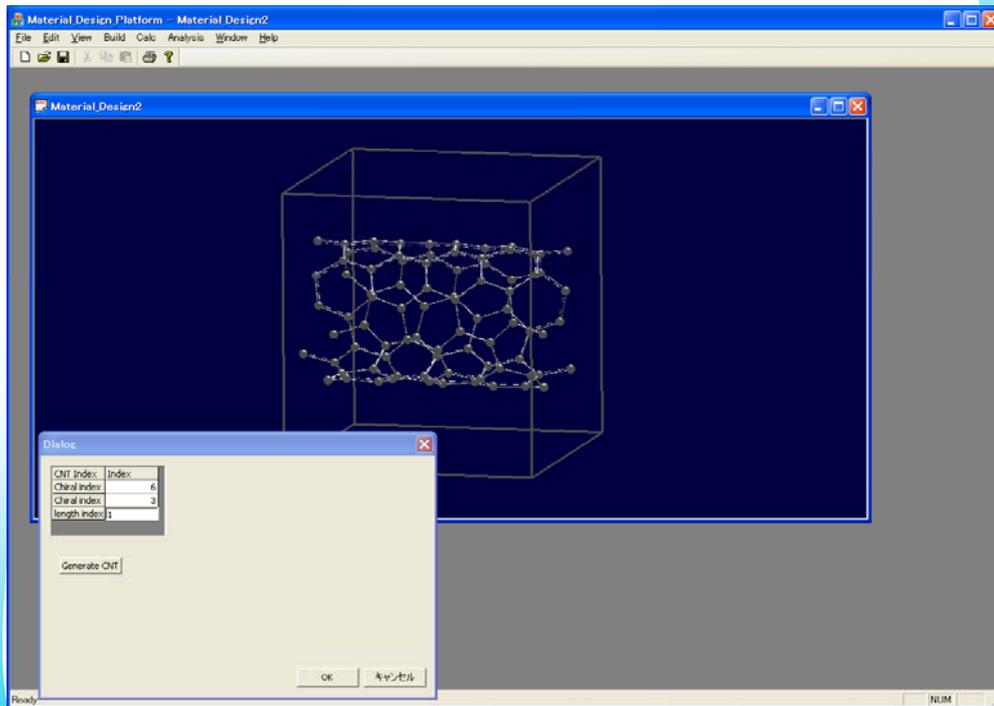
分子動力学計算結果の解析



定温定圧動力学計算により、温度と体積の関係から、ガラス転移温度の解析などが可能。

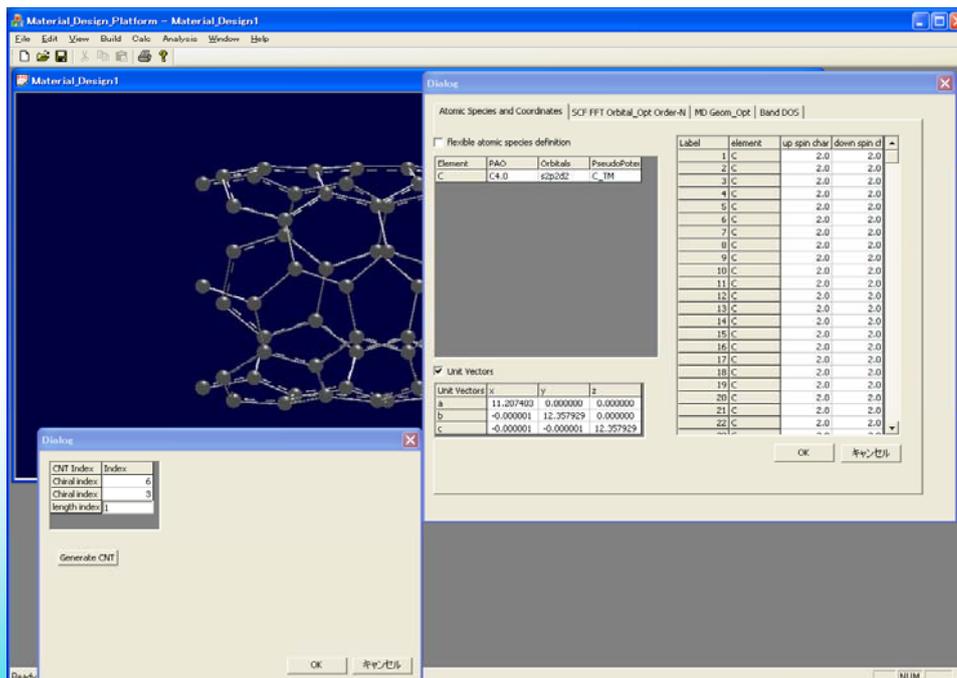
32

カイラル指数入力によるカーボンナノチューブ構造の構築



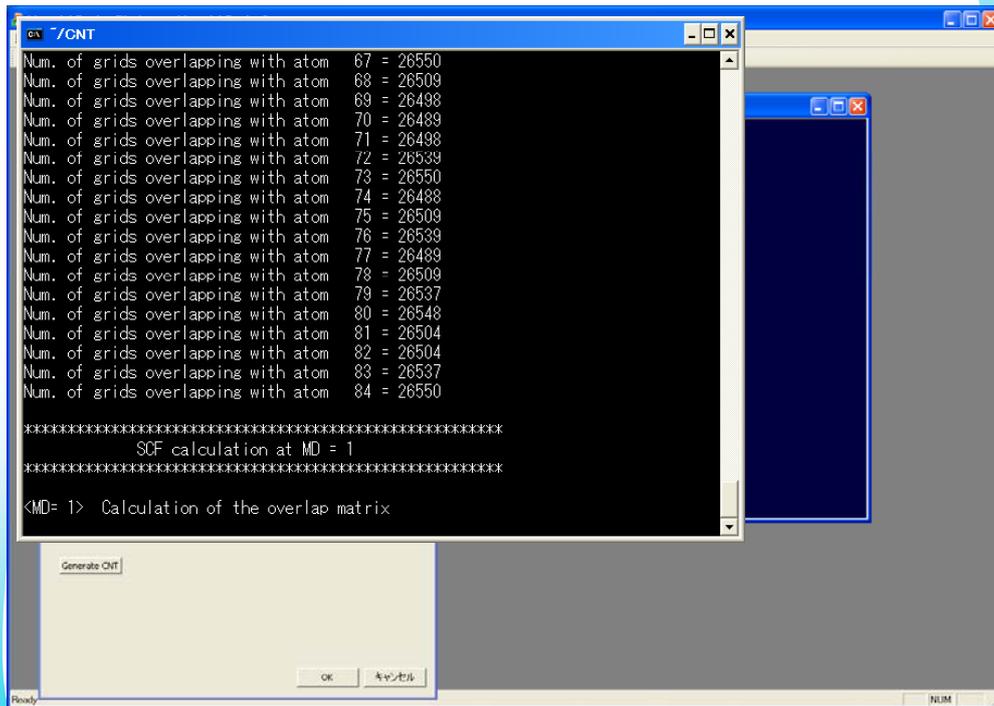
33

OpenMXの計算条件設定。数値局在基底や擬ポテンシャルの選択



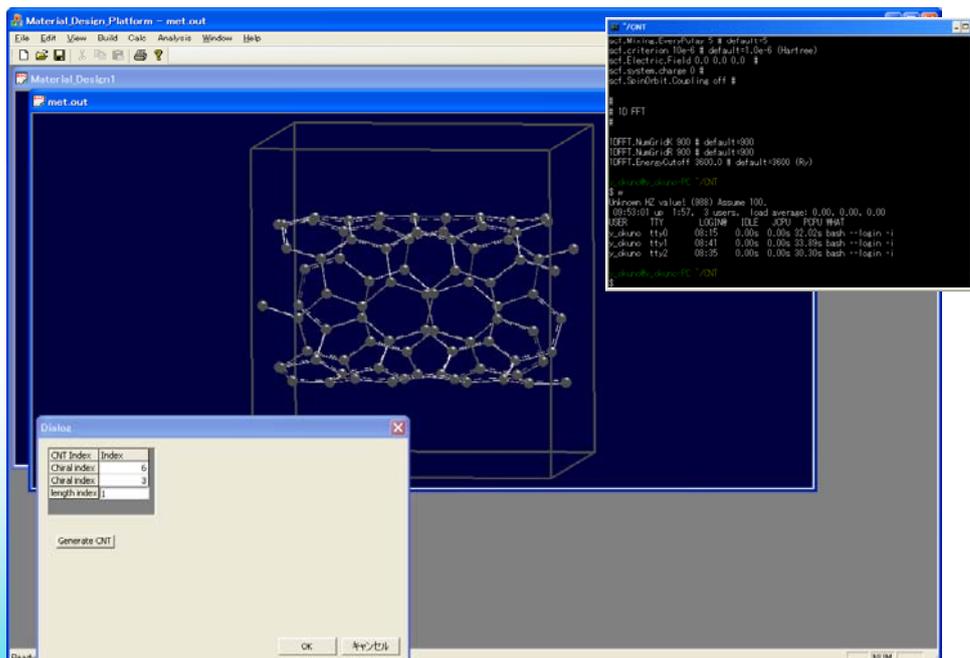
34

OpenMXでの構造最適化計算の実行



35

最適化構造の読み込み



36

