

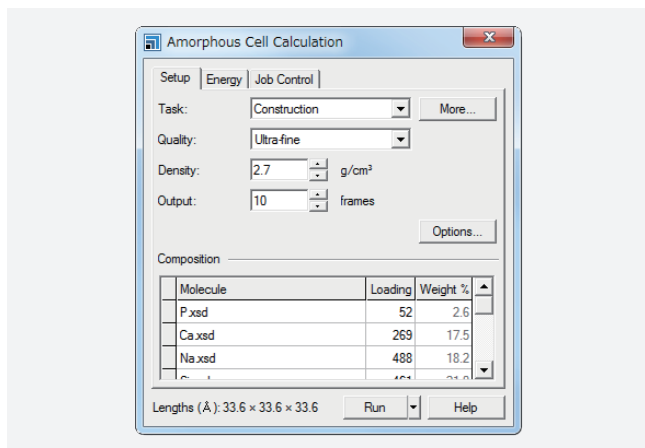
無機アモルファス材料の 分子動力学シミュレーション

背景

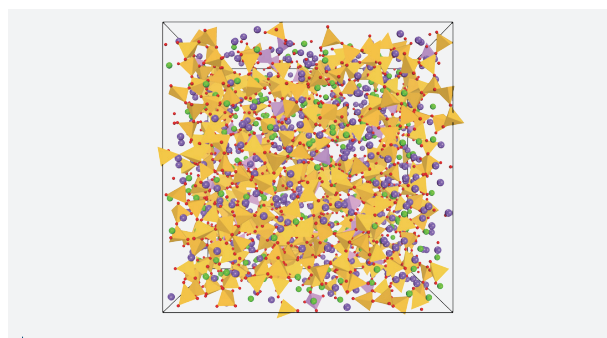
これまで、分子動力学計算は様々な材料の構造や物性の解析に用いられてきましたが、無機アモルファス材料に対しては、アモルファス構造の作成や原子間ポテンシャル(力場)などの問題などがあり、ポリマーなどの有機系のアモルファス材料に比べるとあまり事例は多くありません。しかし、複数の構成要素からなる無機アモルファス材料の原子レベルでの構造が物性に与える影響をシミュレーションにより解析することは、非常に興味深いテーマであるといえます。Materials Studio には、無機アモルファス材料の分子動力学シミュレーションに必要な、アモルファス構造の作成ツール、力場のフィッティングツール、分子動力学計算ツール、さまざまな解析ツールが搭載されていますので、1つのプラットフォーム上で、シームレスにすべての作業を行うことができます。

アモルファス構造の作成

Materials Studio にはアモルファス構造を作成するための Amorphous Cell モジュールが搭載されており、このツールを使うとポリマーや液体などの有機物のアモルファス構造だけでなく、決まった組成になるようにイオンやフラグメントを構成要素とし、それぞれの個数と系の密度を指定することで、無機物のアモルファス構造も簡単に作成が可能です。ただし、そのようにして作った初期構造は非常に不安定であることが多いので、適切な力場を使って構造緩和を行う必要があります。構造緩和は Forcite モジュールを使って行うことができます。



Amorphous Cell モジュールの GUI。密度や組成を指定して、アモルファス構造を作成できます。また、ゼオライトなどの多孔質の空洞や、周期境界条件中の分子構造の周りに指定した構成要素をパッキングすることもできます。



Amorphous Cell モジュールで作成した構造を構造緩和して得られた構造。黄色(シリコン)や薄紫色(リン)の多面体で表される原子が、酸素原子に配位し、主に 4 配位構造になっていることが分かります。

ポテンシャルの作成

Materials Studio には、力場の作成および編集を行うためのツールである Forcefield Editor が搭載されています。このツールを使って、既存の文献などで使われている既知のポテンシャルのうち、対応している関数形のパラメータを GUI に入力するだけで、分子動力学計算エンジンである Forcite モジュールで利用可能な力場のファイルを作成することができます。また、新規にポテンシャルを作成する際には GULP モジュールの Fit Forcefield 機能を使って、自分で力場のパラメータを作成することも可能です。この GULP で作成した力場パラメータを基に、Forcite で計算を実行することができます。

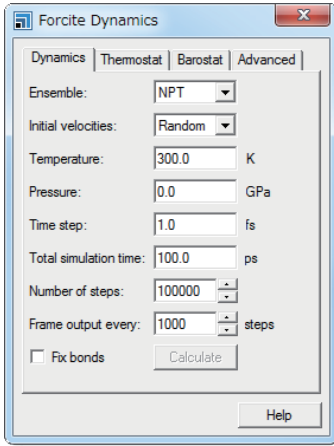
TABULATED FORCEFIELD

ガラス材料の主成分である酸化物のシミュレーションには Buckingham ポテンシャルが利用されるのが一般的で、多くの研究事例があります。しかし、Buckingham ポテンシャルは、短距離で負の無限大に発散する非物理的な振る舞いがあるため、アモルファス構造の分子動力学計算のように原子間距離が非常に近接する可能性があるシミュレーションにおいて、そのまま使用すると、系のエネルギーが発散してしまう場合があります。

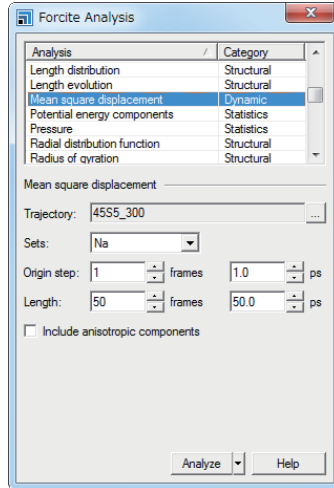
そのような場合、Tabulated Forcefield 機能を使うと、この問題を回避することができます。この機能は、ポテンシャルを関数として取り扱うのではなく、数値的に取り扱います。そのため、ある相互作用が1つの一般的な関数では表すことができない場合に利用できます。例えば、Buckingham ポテンシャルにおいて負の無限大に発散する短距離の部分を別の関数で置き換えることで、上で述べたエネルギーの発散の問題を回避することができます。

分子動力学シミュレーションと結果解析ツール

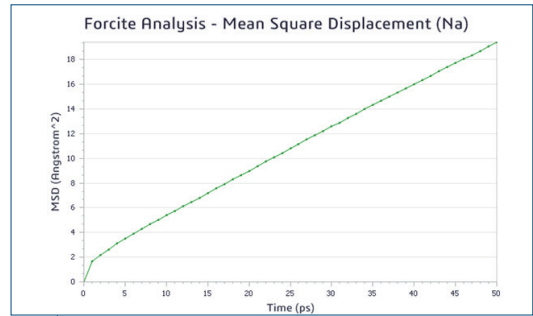
Materials Studio のForcite モジュールは、GUI 上から分子動力学計算の設定、力場や電荷の設定、クローン・vdW 相互作用の評価手法などを選択して簡単に計算を実行することができます。実行中の系のエネルギー、温度、圧力などの変化は、チャートドキュメントとして表示され、逐次更新されてゆきます。また、並列計算にも対応しており、並列化効率も高いので、大規模な系に対しても応用が可能です。計算完了後には、出力された分子動力学計算の各ステップの構造を基に、拡散係数や動径分布関数などの解析を GUI 上から簡単に行うことができます。



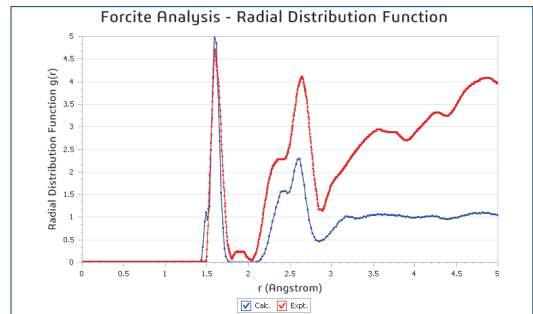
Forcite モジュールの GUI。アンサンブル、温度、シミュレーション時間などの条件を指定して計算を実行することができます。



Forcite の計算結果を解析するための GUI。分子動力学計算で得られた構造の時間発展に対して、平均二乗変位や動径分布関数などのさまざまな解析を行うことができます。



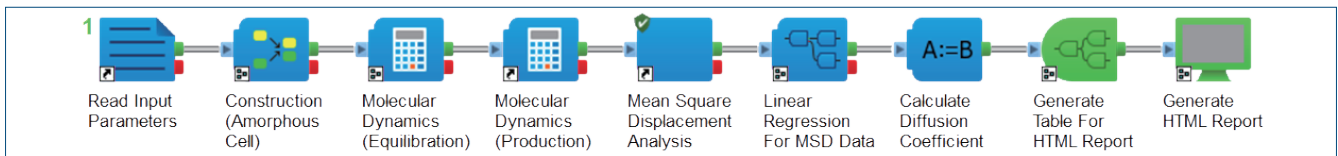
平均二乗変位の解析結果。このプロットに対する近似直線の傾きを 6 で割ったものが拡散係数に相当します。



動径分布関数 $g(r)$ の解析結果。解析結果は実験データと良く一致します。 r が無限大の極限では $g(r)$ は 1 に漸近します。

計算の自動化ツール

一般的な分子動力学シミュレーションは、複数のステップから構成されています。また、組成比を変えた計算や、組成比の同じ構造でも複数の構造に対して統計平均をとる場合など、複数回の計算を行わなければならない場合もあり、それらを一つ一つ手作業で行うのは、人為的ミスが発生しやすくなり、作業の効率も低くなります。そこで、Pipeline Pilot と Materials Studio を組み合わせることで、複数の構造に対する構造発生から拡散係数の計算までの一連の計算を全自動化することができます。



Pipeline Pilot の自動化プロトコルの例。密度や組成を記入したエクセルファイルなどから自動的に計算を行い、最終結果を HTML や PDF ファイルに出力することができます。

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、11の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語) をご参照ください。

