

2010年代初頭に米国に端を発したMaterials Genome Initiativeを端緒として、データ解析に機械学習などの情報科学の技術を取り込んだMaterials Informatics(MI)と呼ばれる研究アプローチが盛んに行われています。MIに使用されるのは、計算化学で得られるデータだけではありませんが、計算データは同じ計算条件を適用することで均質で精度にばらつきが少ないデータ群を得やすい、という点においてMIに適用しやすい、という側面があります。

MIへの適用に限りませんが、計算化学で得られる材料の物性値や特性値は、入力であるモデル構造に依存します。従って、高いクオリティのデータを得るためには、適切なモデル構造を用いる必要があります。また、構造データベース等にはない、バーチャルな構造モデルが必要になることもあるでしょう。

MedeAには、結晶をはじめ、分子、合成高分子など、さまざまな種類の物質のモデル構築を行う機能が搭載されています。本紙面では結晶構造モデルの構築に便利な機能を紹介します。

■ Empty Space Finder

Voronoi解析を行い、結晶中の空隙を探索し、見つかった空隙に収まる最大半径の球を表示します。侵入型の点欠陥モデルを構築する際、その候補となる位置を検討するのに便利な機能です。

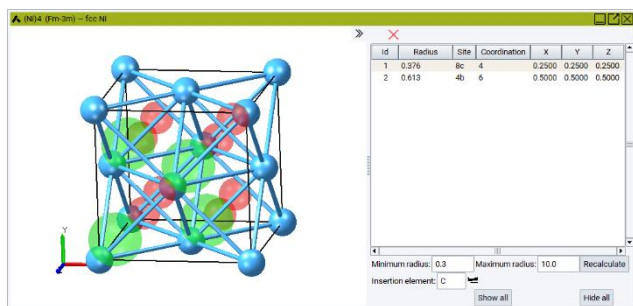


図1. Empty Space Finderで探索したfcc Niの空隙。
青: Ni原子 緑: 八面体サイト 赤: 四面体サイト。

図1にfcc Niの単位格子へのEmpty Space Finderの適用結果を示します。緑と赤の球がEmpty Space Finderにより得られた空隙位置になります。緑の球は八面体サイトに、赤の球は四面体サイトに位置します。原子挿入はマウス操作で簡単にできます。四面体サイトにC原子を挿入したモデル構造を図2に示します。図2では、単位格子の対称性をP1とし、ひとつの四面体サイトにのみ原子を挿入しています。

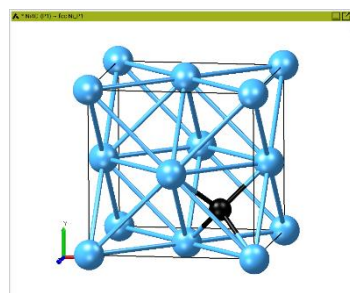


図2. P1対称で四面体サイトに炭素原子を挿入したfcc Niモデル。

■ Substitutional Search

原子置換モデルを網羅的に探索します。置換型の点欠陥モデルの構築に便利です。原子を置換するだけでなく、空孔とすることもできますので、ショットキー欠陥モデルの構築にも役立ちます。

Substitutional Searchは、置換位置が複数の場合に威力を発揮します。例として、64原子からなるfcc Agのスーパーセルに対して、Au原子で3か所の置換を行なってみます。図3にSubstitutional Searchの適用結果を示します。図3下部のリストのうち、桃色で示す領域が3原子置換のモデルに対応し、計14モデル作成されたことが分かります。等価なものは集約され、Weightに反映されます。

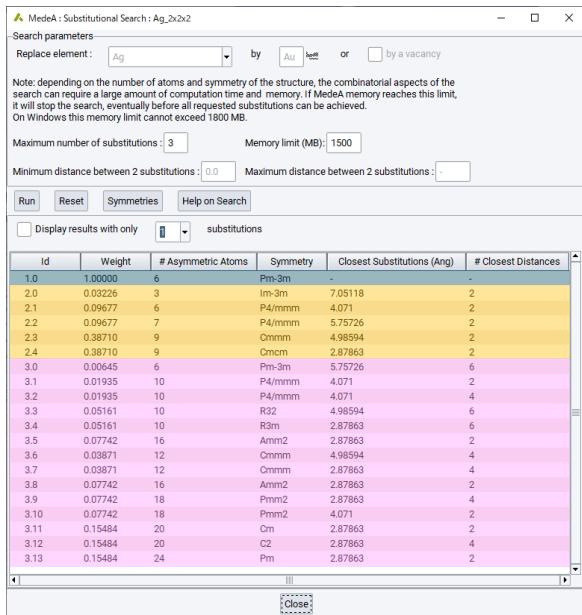


図3. Substitutional Searchによるfcc Ag 64原子スーパーセルに対するAu 3原子置換の適用画面。

リストの行を選択し、マウス操作でMedeAメインウィンドウに構造表示が可能です。図5に3原子置換された全構造表示画面を示します。



図4. Substitutional Searchにより探索されたfcc Ag 64原子スーパーセルに対するAu 3原子置換の全構造。

■ Supercell Builder

各格子軸方向に倍数を指定してスーパーセル(超格子)を構築します。前節で使用したfcc Ag 64原子スーパーセルの様に、単純に格子軸を数倍して構築されるスーパーセルは多用されるため、本機能はよく使われる機能の一つです。図5にfcc Agの構築例を示します。

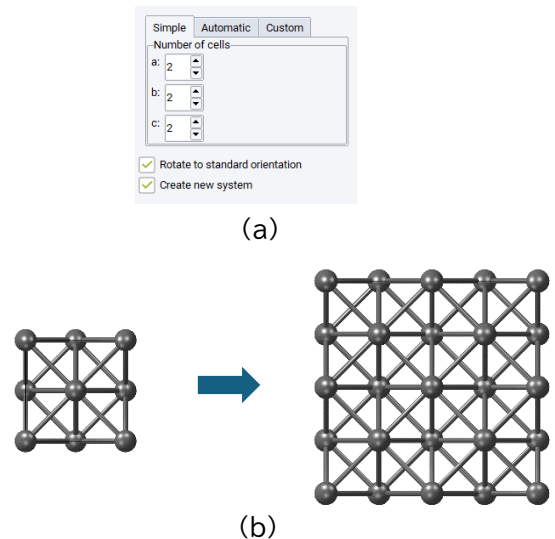


図5. 単純な格子軸方向への拡張によるスーパーセルの構築例。(a) Supercell Builderでの格子ベクトル倍数指定の設定パネル (b) (a)の設定を用いたfcc Agのスーパーセル。

またSupercell Builderでは、格子ベクトルの合成で新しい構造の格子軸を指定することも可能です。本機能を用いることで、例えば六方晶の基本格子から直方形の超格子モデルを構築することができます。図6ではコバルト酸リチウムを例に、変換前後の構造を示します。

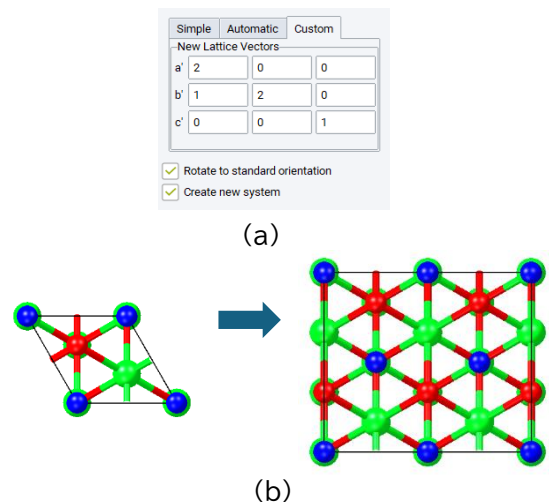


図6. 軸変換により格子形の異なるスーパーセルへの変換例。(a) Supercell Builderでの新しい格子ベクトルの設定パネル (b) (a)の設定を用いたコバルト酸リチウムのスーパーセル。