

SciMAPSは、量子化学計算からメソスケール計算まで時間的にも空間的にも異なるさまざまなスケールの計算手法に対応した材料設計支援プラットフォームです。ここでは、界面や表面のシミュレーションに必要となる層構造構築をSciMAPS上でどのように行うかについて説明します。

■層構造に必要な分子とその数の見積もり

層構造を構築してシミュレーションを実行する場合、想定しているシミュレーションの内容や計算コストを考慮して、分子層の厚み、表面の大きさ、密度から各層内の分子数を予め決めておきます。SciMAPSのAmorphous Builder (以下AB) では入れる分子数、密度、格子の大きさを変更して分子の占める空間の大きさを見積もることができます。これをそれぞれの分子種に対して行います。最終的に界面を成す各層の表面は同じ大きさになる必要がありますので、ABは格子軸a、bの長さを固定して分子数、密度、厚みを調べていきます。ここでは100量体のポリエチレンオキシド (PEO) と水の界面を例とします。分子量の小さい水の方が格子の大きさを調整しやすいので、先にPEOでa、bの長さおよびc (後の厚み) を指定します。PEOの密度を1.2 g/cm³、5本鎖で層を作成する場合、a、bをそれぞれ30Åにすると厚みが約34Åになります。水分子の層を同じ厚みにしてa、bを30Åにすると水の分子数は1024となります。ここでは、最終的にはこの2層を詰めた30×30×68Åの格子モデルを作成します。

■Amorphous Builderによる層構造の構築

ABにより層構造を構築します。先ほど調べたとおり5本鎖でa、b、cをそれぞれ30、30、34Åにすれば目的の密度でPEOを詰め込むことができますので、これを30×30×68Åの格子にABで詰め込みます。詰め込む際にGUI上でその領域を定義します。このとき少々密度が高くなりますが、続くLAMMPSによる緩和における過度の原子間衝突を避けるため、上下に3Å程度余白を持って詰め込みます。

■LAMMPSによる層構造の緩和

低分子からなる層を作成する場合、つめこみによる粗密があまりなく緩和が速いためこの手順は必要とならないことが多いのですが、ある程度緩和させた状態の2層を作りたい場合は、分子動力学計算ソフトLAMMPS

を利用したモデル構築が推奨されます。本例では、LAMMPSが持つポテンシャルの壁の機能を利用して構築した高分子を領域に押し込めた状態でエネルギー極小化計算、分子動力学計算を行い、作成した高分子層を緩和させます。LAMMPS計算では、c軸方向に周期のない設定とLJ12-6のポテンシャルによる壁を設定します。SciMAPSのGUIにより得られる入力に対して、周期境界の設定ならびにポテンシャルの壁の設定に関する2行を追加し、計算を実行します。(なお、利用するコマンドはboundaryおよびfix wall/lj126です。詳細設定については、LAMMPSのオンラインマニュアルをご参照ください。) これにより、図1に示したように指定した空間に閉じ込められた状態で緩和した構造を得ることができます。

■層構造の追加

層を追加するには前々項で作成した方法と同様に分子を選択し配置する領域を指定します。今回の場合は、追加する層 (今回は水分子の層) が低分子のため緩和が早いと考えられることから、別途緩和させる必要はないと考えられます。しかしながら、高分子等、緩和しにくい層である場合、ABで層を挿入後、既存の層を固定してポテンシャルの壁を定義し、LAMMPSで層を緩和させると良いでしょう。SciMAPS上で固定したい分子層をFixコマンドで固定した後、ポテンシャルの壁の定義をすると追加層を緩和することができます (図2)。

■構築した層構造によるシミュレーション

構築した層構造を利用することで、界面を引き離すようなシミュレーションや界面での分子の分布状態のシミュレーションなど、さまざまな界面の計算が行えるようになります。

また、この構造構築法は高分子-高分子、固体-低分子など各種系への適用が可能です。ご興味のある方は是非お問い合わせください。

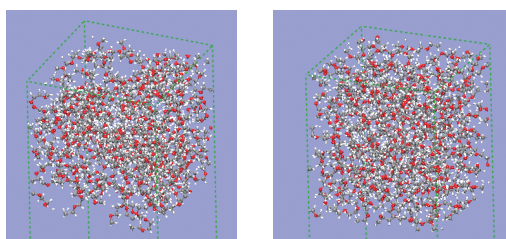


図1 ポテンシャルの壁による緩和 (左:緩和前、右緩和後)

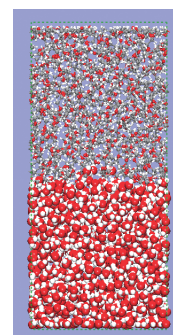


図2 構築された水、PEO層のモデル