

複雑な構造構築事例

分子シミュレーションを成功裏に行うには研究対象となる分子系のモデル化の成否が重要です。SciMAPSの構造構築機能は、高分子鎖、結晶構造、表面構造などを作成する基本構造構築機能、アモルファス構造や界面構造の基本構造を複数組み合わせた構造を作成する複合構造構築機能、架橋構造やカーボンナノチューブを構築する特定構造構築機能の三つからなります。これらの機能を組み合わせることによって、研究対象にマッチした分子モデルを構築します。本稿ではこれらの機能を工夫して利用することで、より複雑な系を構築する二つの例を紹介します。

■ 架橋分子膜 - 水の界面構造の構築

高分子は分離膜や表面コーティングとして広く利用されていますが、架橋により分離性能や機械強度の向上が図られています。このような系のシミュレーションを行う場合、架橋高分子膜と他の分子からなる層との境界面を作成する必要があります。

通常、高分子 - 水の二層構造を構築する場合は、一軸方向（例えばZ軸方向）にはみ出ない高分子の層を作成し、セルを軸方向に伸長して真空層を作り、そこに水分子の層を形成するように挿入するという手順で層構造を作成します。一方、架橋構造構築ツール Cross-link Builder では、架橋モノマーからなる系に対して、反応点間に結合を生成することで架橋高分子のモデルを構築します。架橋生成の過程で三次元周期境界条件を利用しているため、周期境界をまたぐ結合が形成される可能性があります。周期境界をまたぐ結合が伸長する軸方向に存在すると、セルを伸長する際に結合の切断や分子配置の変更が必要となり、自然なモデルを得ることが難しくなります。

この問題を避けるため、SciMAPSの表面構築機能とアモルファス構造構築機能により、仕切りとしてXY面に平行なグラファイト2枚と架橋モノマーからなる層を作成します。この系に対して、Cross-link Builderを利用して架橋構造を構築します。2枚のグラファイトにより、架橋点同士の距離が近づくことができないため、Z軸方向に境界をまたぐ結合のない架橋構造を作成できます。得られた構造のセルの一边を拡張し、2枚のグラファイトを削除し、これをマトリックスとして、アモルファス構造構築機能で水を配置することで架橋分子膜 - 水の界面構造のモデルを構築することができます（図1）。

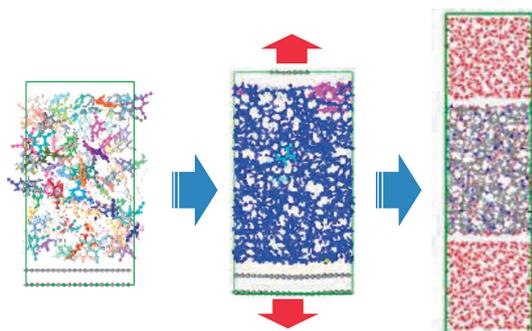


図1. 架橋分子膜 - 水界面モデル構築。架橋前（左）、架橋後（中央）、界面モデル（右）

■ 内包ナノチューブの構造構築

内部の空洞に原子、分子を取り込んだカーボンナノチューブは内包ナノチューブ（以下、内包 NT）と呼ばれ、新しい電子デバイスとして期待されています。内包 NT のモデル構造を構築する場合、ナノチューブ構築機能を使って構築したナノチューブをマトリックスとして、分子をナノチューブ空洞内に配置する必要がありますが、アモルファス構造構築機能では、空洞からはみ出た構造を構築してしまいます。そこで、ナノチューブの外の空間に金属原子（ここでは Fe 原子）を仮想的に配置し、これをマトリックスとして、内包される分子なるべくナノチューブ内に入るように構築します。この方法では指定した個数の分子がナノチューブ内に収まらないことがあります。このような場合は、ナノチューブからはみ出た分子を削除したモデルをマトリックスとして新たに指定し、削除した分子数分の分子を再度挿入します。これを数回繰り返すと内包 NT が得られます（図2）。得られた内包 NT のモデルに溶媒などを追加することで、より現実的なモデルを構築できます。

ここで紹介した方法は基本的に分子や原子を鑄型として利用しています。これら分子鑄型と SciMAPS の構造構築機能を利用することで、さらに複雑な構造を作成することが可能と考えられます。

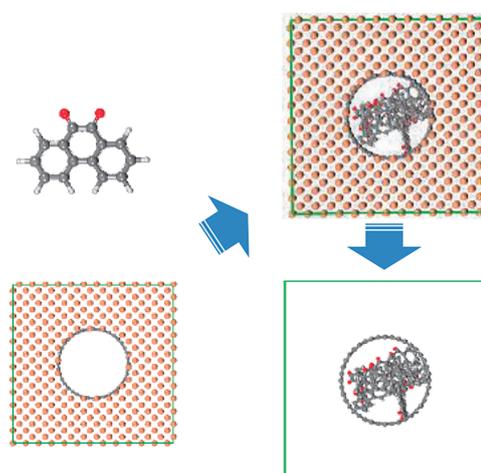


図2. 内包 NT のモデル構築。内包分子とマトリックス（左）、挿入後（右上）、内包 NT（右下）