設計

活用事例あり
→p19 CASE1

材料物性シミュレーション装置

有機・無機・ハイブリッド材料の物理的・化学的特性をシミュレーションする統合システム

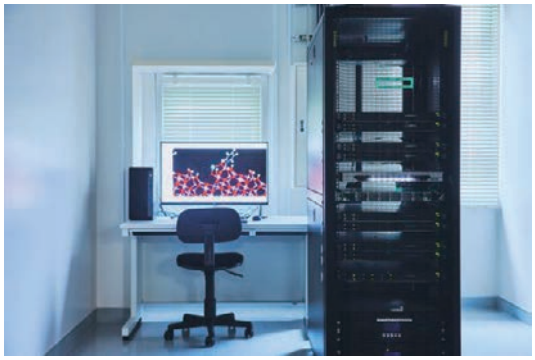
- ▶ 直感的に操作できるGUI(グラフィカル・ユーザインターフェース)を搭載
- ▶ ナノスケールからマクロスケールまで、多彩な分子モデルの計算が可能
- ▶ 分子モデルの構築、計算の実行、結果の解析まで1つのソフトウェアで完結

装置の外観・ワークステーションのスペック

OS: Red Hat Enterprise Linux release 8.6

管理サーバー: 1台
CPU: Intel(R) Xeon(R) Silver 4208R @ 2.10 GHz (max 3.20 GHz)
1 CPU搭載　総コア数: 8 cores / 16 threads
RAM: 16 GB × 8枚 = 総RAM 128 GB

計算サーバー: 8台
ms-keisan01 – 08
CPU: Intel(R) Xeon(R) Silver 4214R @ 2.40 GHz (max 3.50 GHz)
2 CPU搭載　総コア数: 24 cores / 48 threads
RAM: 16 GB × 24枚 = 総RAM 384 GB



装置の外観

計算ノードを8台使用することにより、1ジョブ: 最大192 coresの並列計算が可能

GUIの外観・実行可能な計算事例

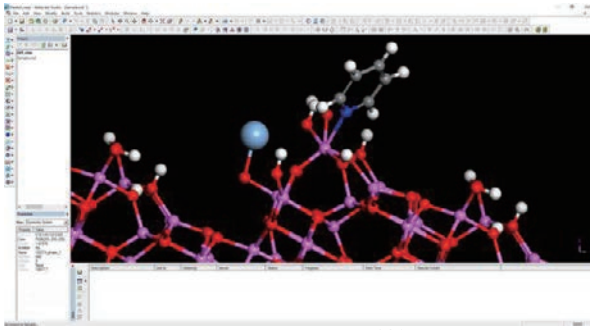


① Adsorption Locator

温度をゆっくりと下げながら（Simulated Annealing)、吸着材ー吸着分子間の相対的な配置のモンテカルロ探索を行うことで、可能性のある吸着配置を明らかにすることができる。

② Amorphous Cell

分子やポリマーのモデルを用いて、3次元周期境界条件を課した単位格子の中に、任意の密度、サイズのアモルファスモデルを構築することができる。



GUI (Visualizer)の外観

③ CASTEP / ④ DFTB+ / ⑤ DMol³

密度汎関数理論(Density Functional Theory: DFT)に基づき、 主に3次元周期境界条件をもつ固体モデルや、表面モデルのシミュレーションが実施可能。格子定数、分子構造、弾性定数、バンド構造、状態密度、電子密度、遷移状態計算(活性化エネルギー)、励起状態計算(UV-Vis, XANESスペクトルのシミュレーション)、NMRの化学シフト計算など多彩な計算と結果の解析がシームレスに実行できる。

⑥ Forcite / Forcite Plus

古典分子動力学計算(MD)が実施可能。COMPASS力場を組み合わせることで、DFTでは扱えないような大規模なモデルの密度、拡散性、力学的性質などを高精度に予測できる。また、解析ツールを利用することで、細孔内の物質拡散のような時間依存性の物性を解析したり、ヤング率などの力学的特性、凝集エネルギー密度、溶解度パラメータなどの特性を計算したりすることができる。

⑦ Sorption

ゼオライトなどの多孔性物質や、固体表面における、吸着等温線のシミュレーションが実施可能。

【担当者】
化学プロセス研究部門　有機資源変換研究グループ　峯 真也
連絡先：M-tohoku-nepp-ml@aist.go.jp

NEPP

産総研
ともに挑む。つぎを創る。

CASE1

材料物性シミュレーション装置
Materials Studio
活用事例１

こんな使い方ができます

実験では求めることが難しい物性を取得して効率的な材料開発に！

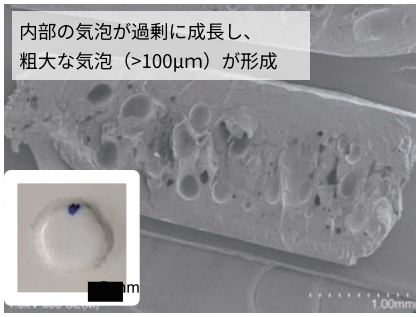
使用例

ポリマーに溶解したガスの拡散挙動の評価

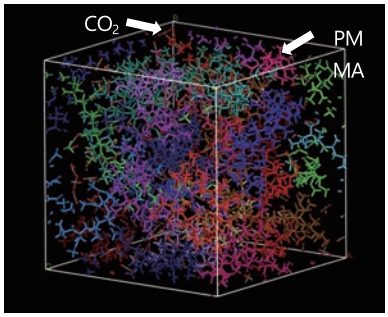
- Materials Studio (Forcite Plus) を利用することで、エネルギー計算／構造最適化／分子動力学シミュレーションが可能。
- Forcite PlusとCOMPASS力場を組み合わせることで、系の密度、拡散性、力学的性質などを高精度に予測可能。
- 構造作成および可視化にはMaterials Studio Visualizerを利用することで、対象とするモデル系を容易に構築することが可能。
- 幅広い解析ツールを利用することができ、密度変化のような基本物性の解析から双極子自己相関関数のような高度な物性まで多くの物性を予測可能。

→ ポリマー発泡体の開発において、本ソフトを使用することで実験では求めることが難しいポリマーに溶解したガスの物性を評価できるため、発泡メカニズムの解明や、最適な発泡条件の効率的な探索が期待できます。

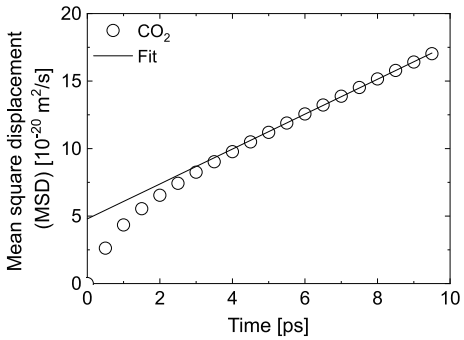
CO_2を利用して作成したPMMA発泡体



発泡剤としてCO_2を利用して作成したPMMA発泡体の外観とSEM観察画像

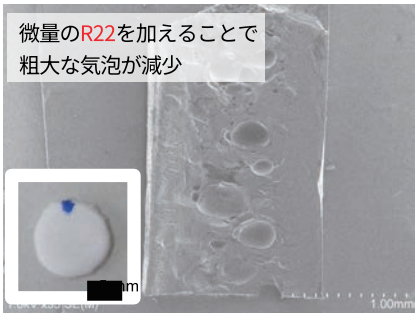


PMMA+CO_2系の分子動力学計算のスナップショット

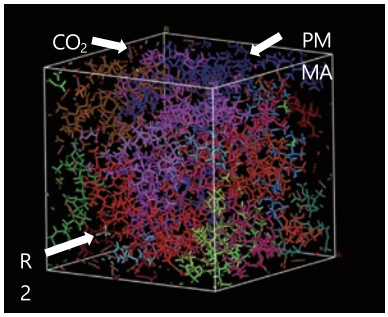


ポリマー中のCO_2分子の平均二乗変位（MSD）

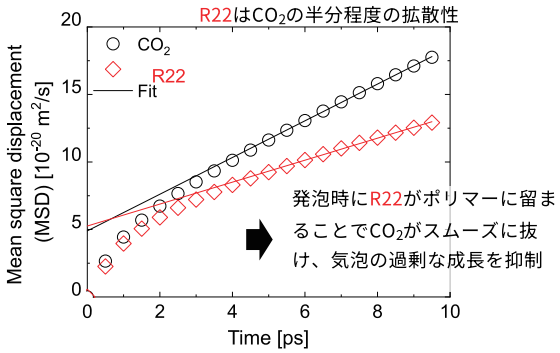
CO_2+R22混合ガス（1.5 mol%）を利用して作成したPMMA発泡体



発泡剤としてCO_2+R22混合ガスを利用して作成したPMMA発泡体の外観とSEM観察画像



PMMA+CO_2+R22系の分子動力学計算のスナップショット



ポリマー中のCO_2分子とR22分子の平均二乗変位（MSD）

【担当者】
化学プロセス研究部門　機能材料プロセス研究グループ　小野 巧
連絡先：M-tohoku-nepp-ml@aist.go.jp

NEPP

産総研
ともに挑む。つぎを創る。