

高分子物性インフォマティクスのための 分子動力学シミュレーション自動化システムの開発

林 慶浩 ものづくりデータ科学研究センター 特任助教

背景:

高分子はプラスチックやゴムに代表されるように、身近に使用されている素材である。一方で、複雑系であるため、高分子材料の物性データベースの整備は、無機素材と比べて遅れている。データ駆動型材料開発を高分子材料に適用するために、高分子材料の物性データベースの構築が求められている。高分子材料の計算物性データベース構築のために、分子動力学シミュレーション自動化システムの開発を行った。

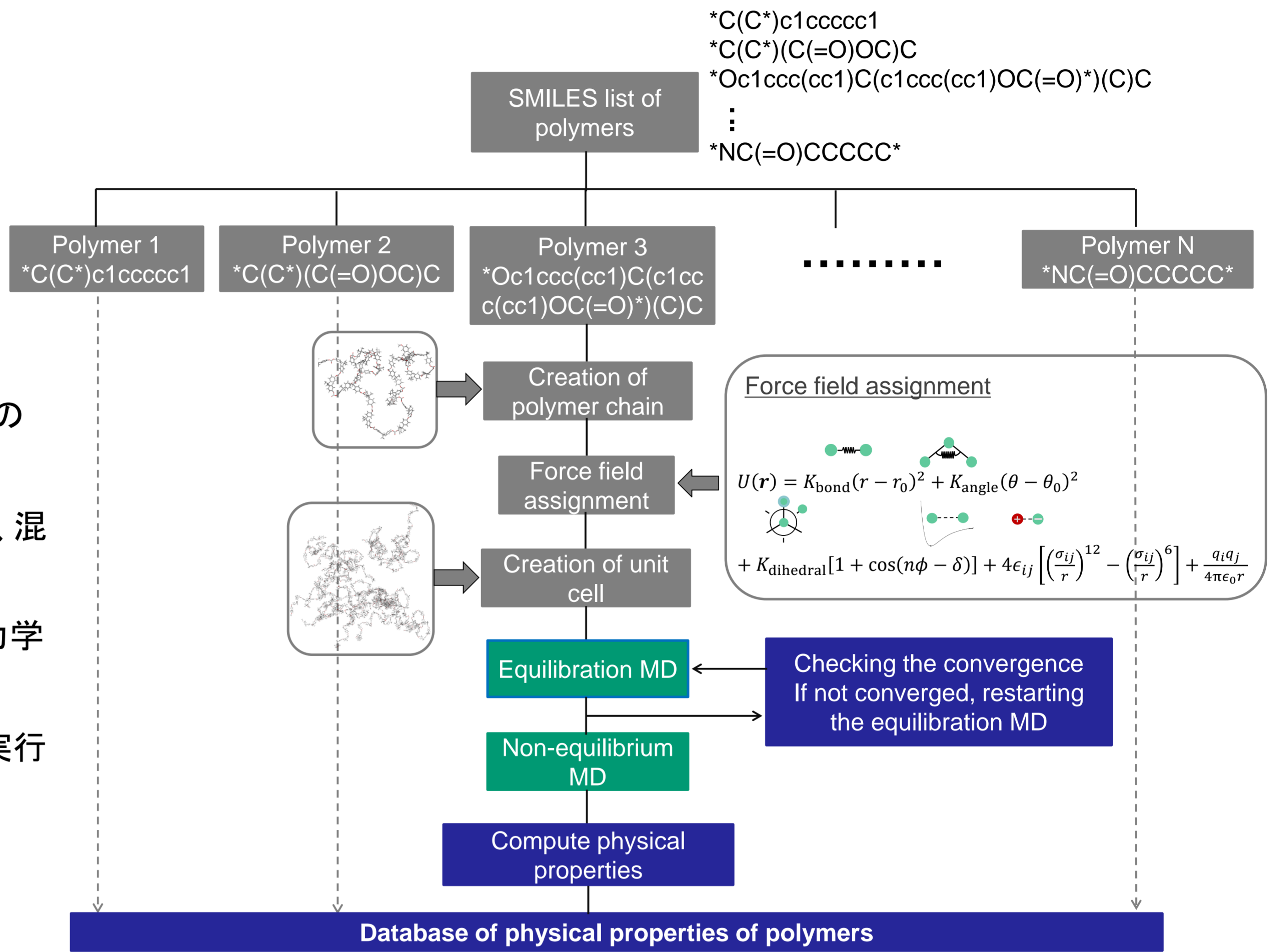
システムの概要:

RDKitベースのPython ライブラリ

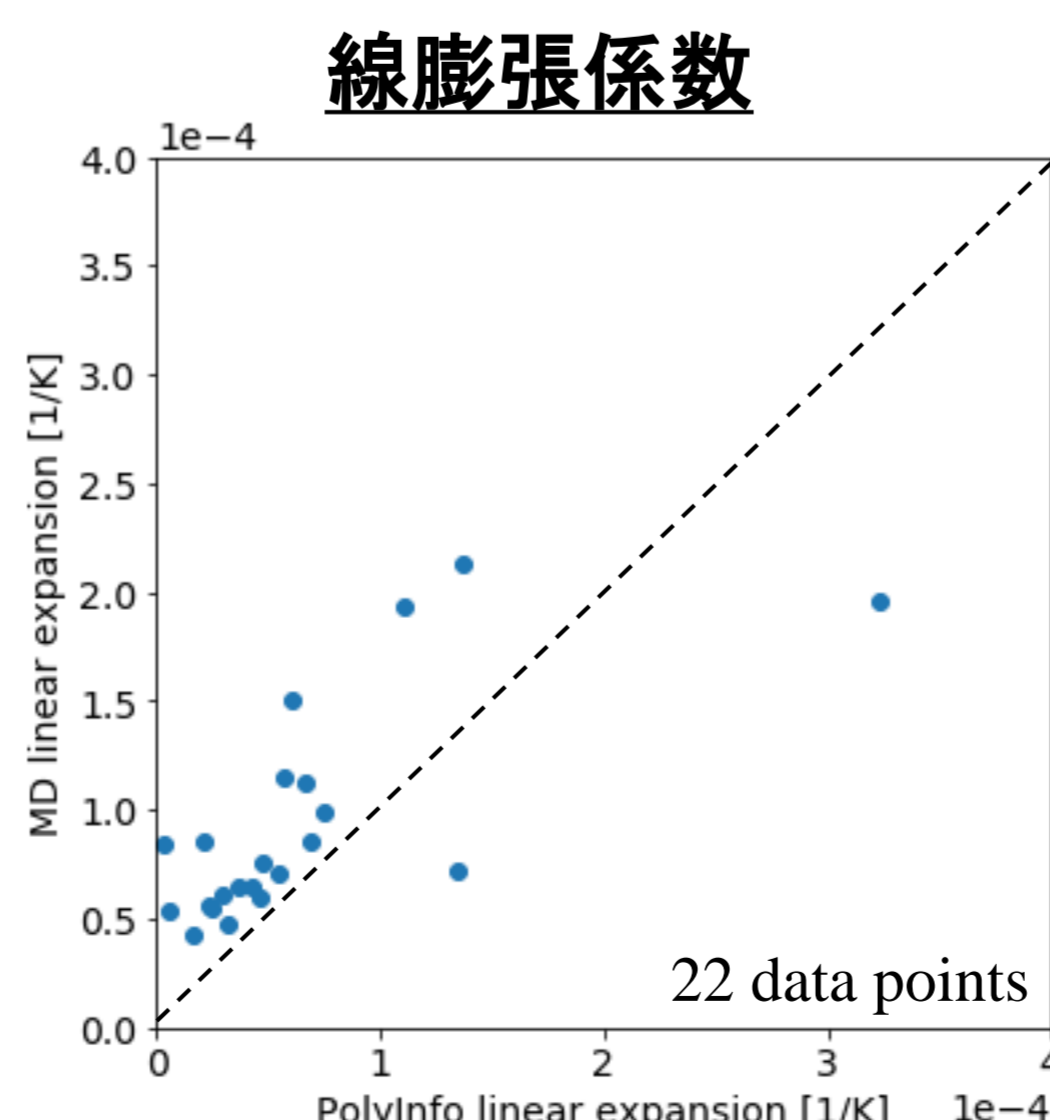
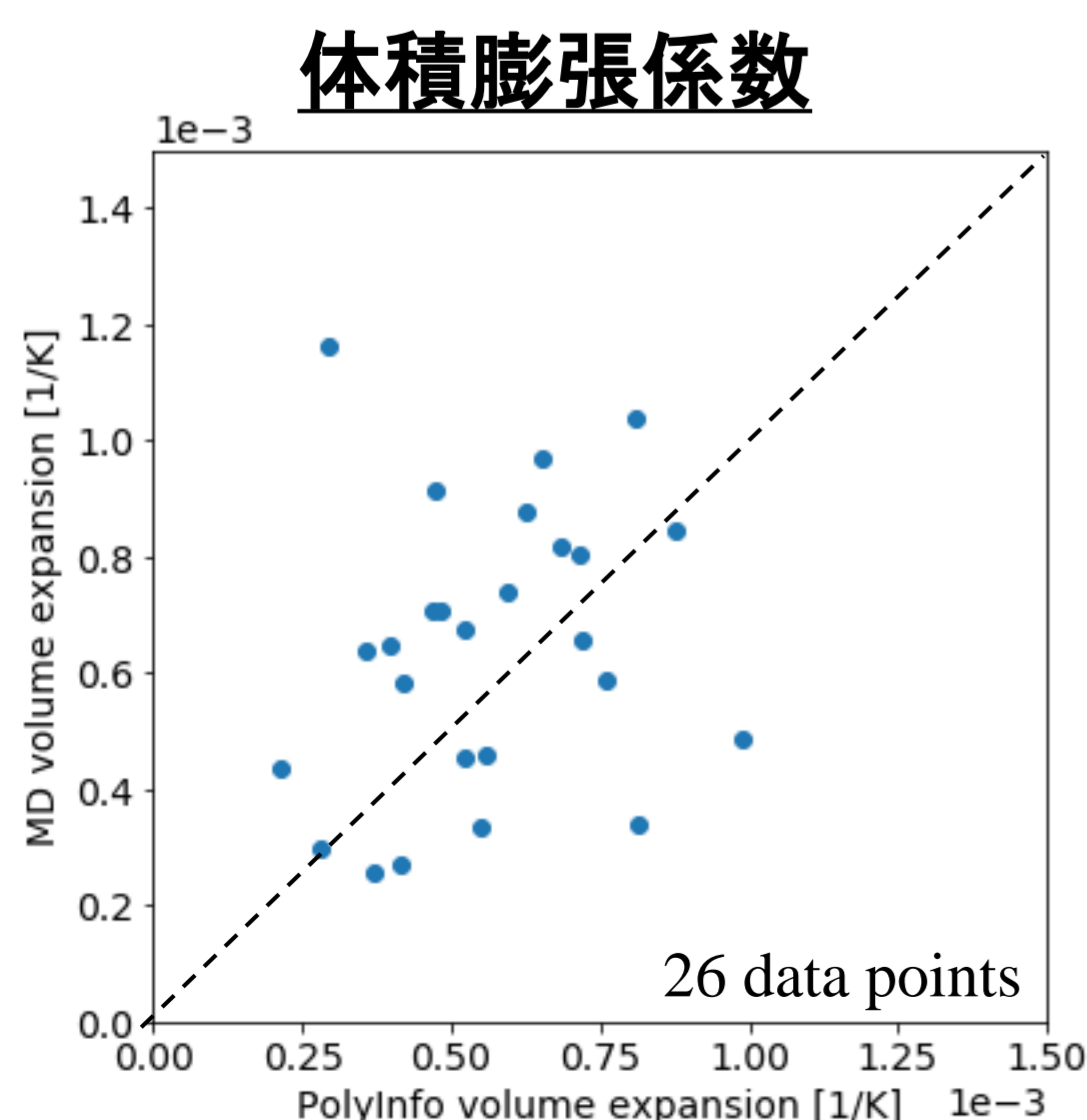
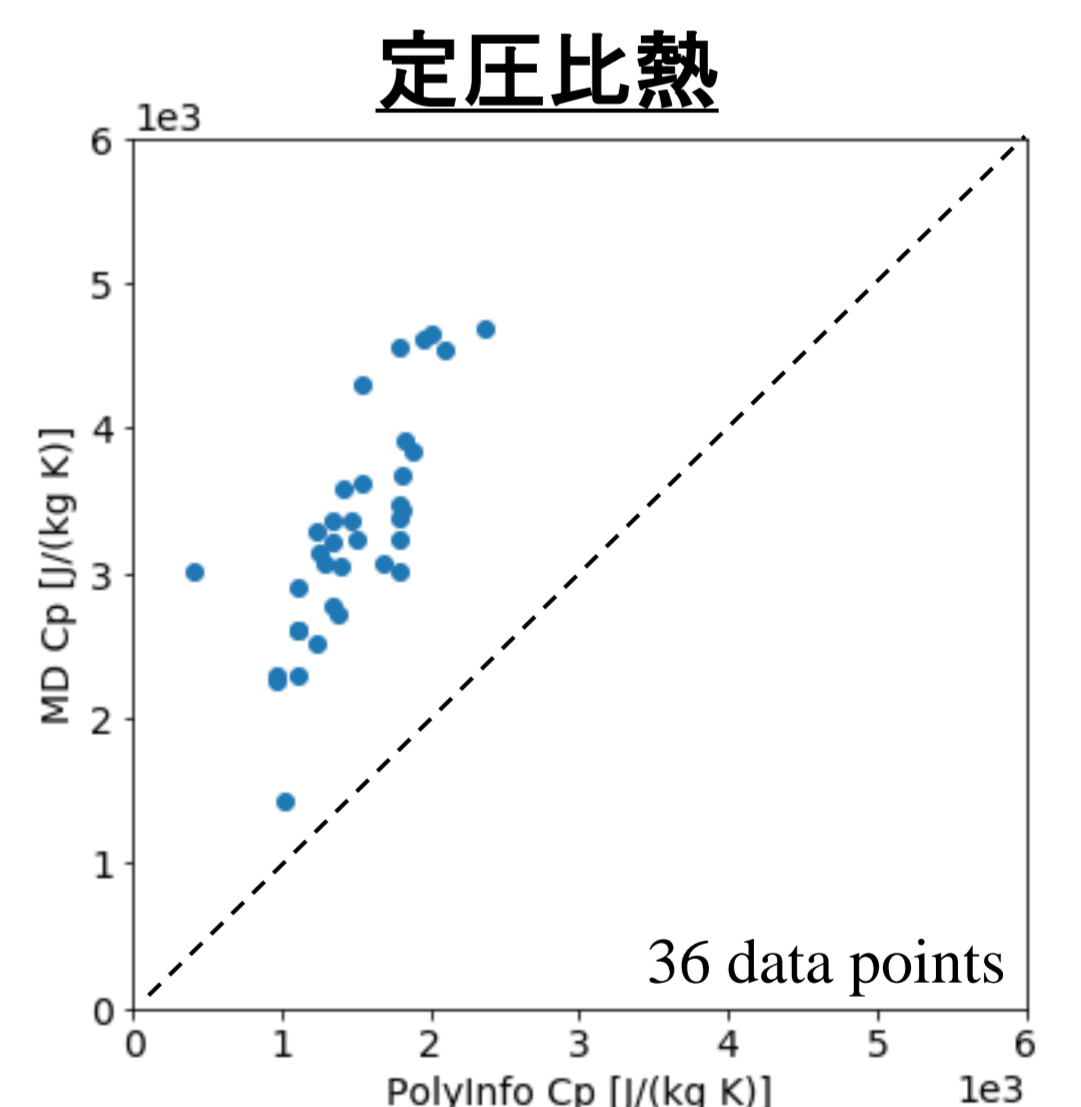
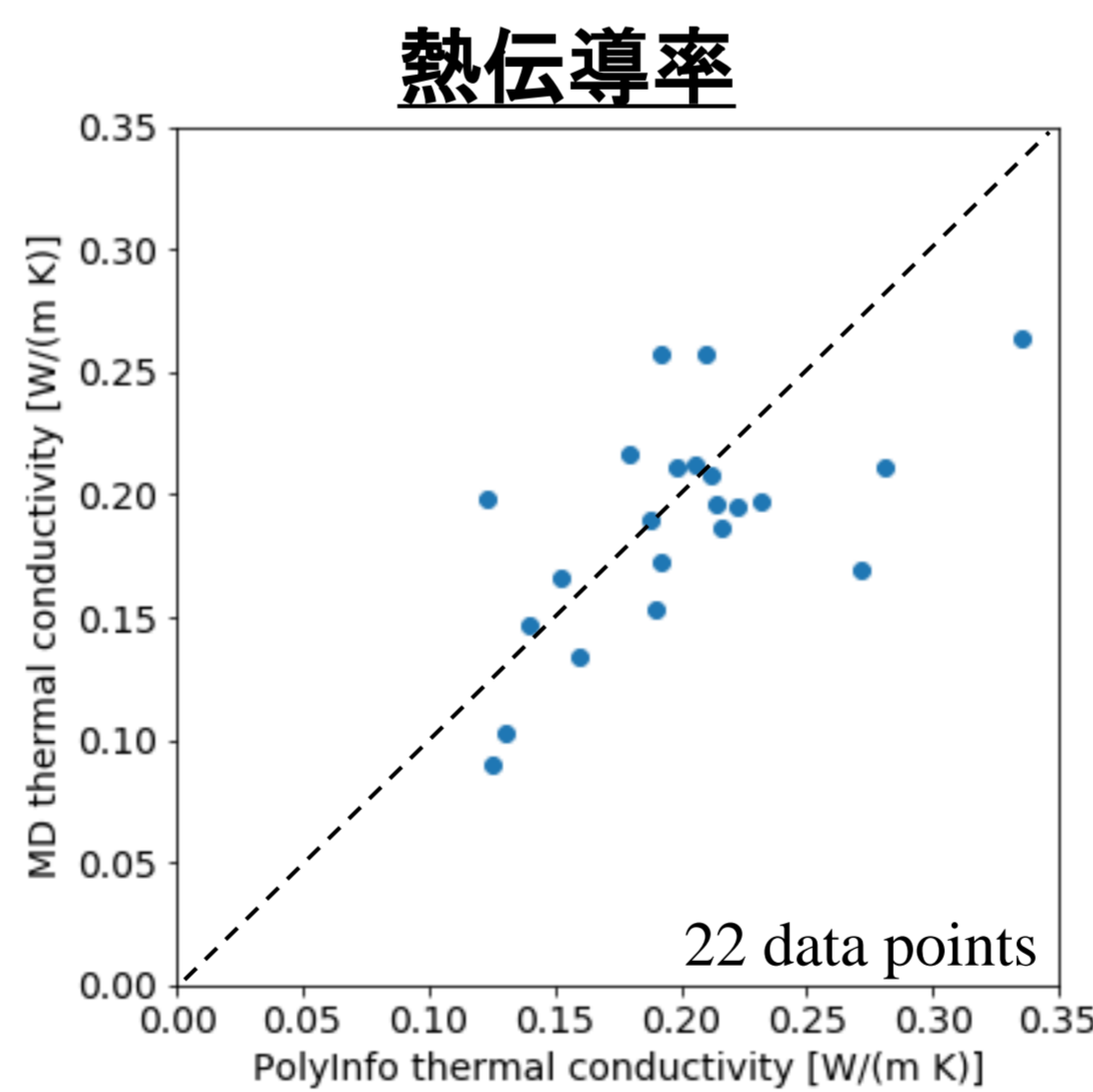
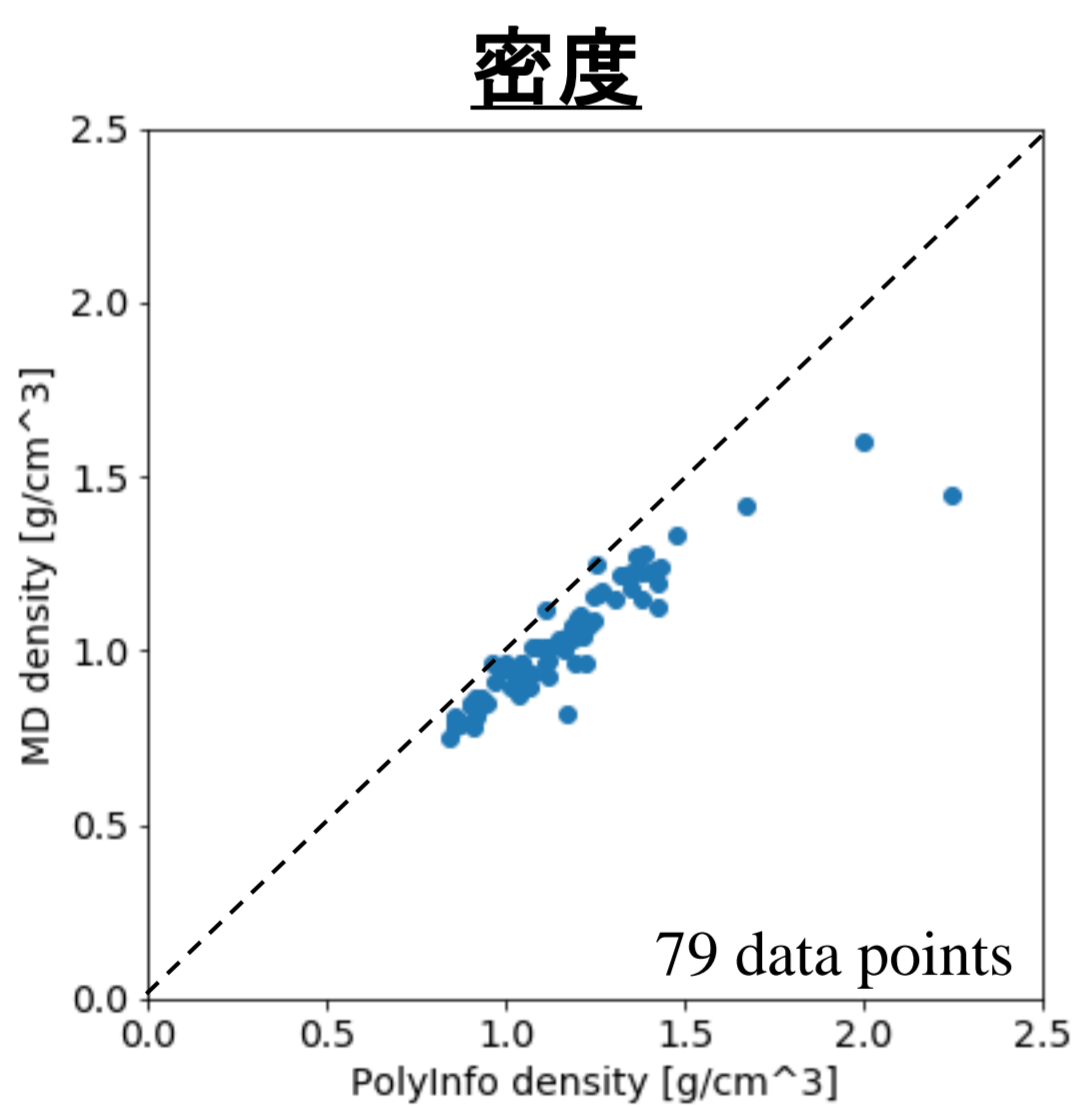
入力: SMILES

計算フロー:

1. ETKDG法によるモノマーの立体配座生成
2. Random walk法によるポリマー鎖の生成
3. 古典分子動力学計算用の力場パラメータの自動割り当て
4. シミュレーションセルの作成(アモルファス、混合系、配向構造モデル、結晶モデル等)
5. MD計算ソフトLAMMPSを用いた分子動力学シミュレーションの実行(平衡化)
6. 物性計算のための非平衡分子動力学の実行
7. 物性値の算出



計算実施例(測定データとの相関):



- 密度と熱伝導率は良い相関
- 定圧比熱の計算値は測定値の約2倍 (量子力学的な効果が計算に含まれていないための誤差)
- 体積膨張係数と線膨張係数はやや弱い相関