

MedeA

材料設計支援統合システム

Materials Exploration and Design Analysis



<https://www.molsis.co.jp/>



Materials Design社 日本総代理店

株式会社モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀

Tel: 03-3553-8030 Fax: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp <https://www.molsis.co.jp/>

開発元: Materials Design社 (<http://www.materialsdesign.com/>) もあわせてご覧ください。

※記載の商品名は各社の商標または登録商標です。

※本カタログの仕様は予告なく変更する場合があります。

ここから始まる、材料設計。

MedeA

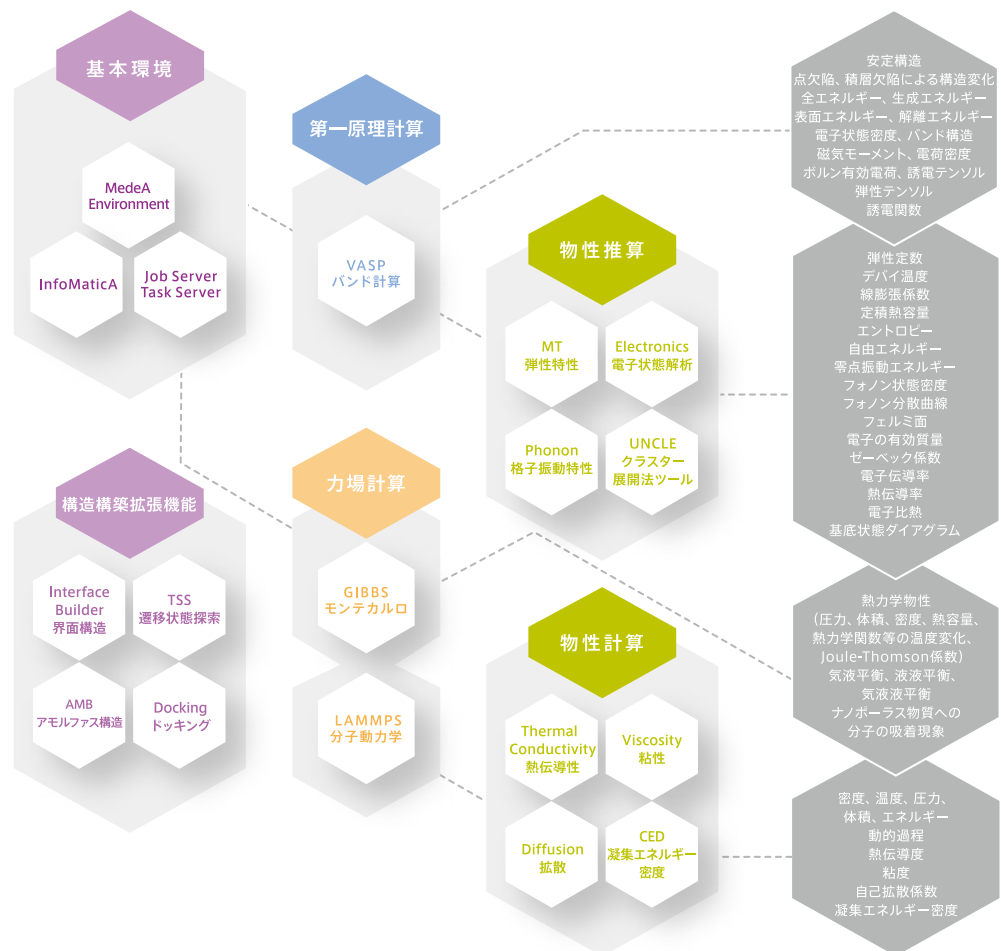
— Materials Exploration and Design Analysis —

MedeAが提供する計算環境

MedeAは、材料設計のための統合的な計算環境を実現するソフトウェアです。既存の分子設計ソフトウェアに見られる「計算ソフトウェアのインターフェース」の枠から脱し、「データベースやネットワークの技術を融合し、シミュレーションを効率的に行うための統合環境」としてデザインされています。

MedeAが提供する計算環境では、バンド計算を基に、金属・セラミックス・半導体などの材料に対する、構造評価、光学物性、磁性、熱力学物性、弾性、振動、電子伝導性といった物性を評価することができます。また、モンテカルロ計算や分子動力学計算を利用することで、流体や高分子を対象にして熱力学物性や相平衡、粘性、熱伝導性、拡散を評価することができます。

MedeAは、計算プログラムやその結果を基に物性値を導くツールを組み合わせ、物性評価を行います。研究の目的に適したツールを組み合わせることで、効率的な計算環境を構築することができます。



構成例

計算の目的に合わせて、以下のようなパッケージを用意しています。他の各ツールを組み合わせ、研究に必要な計算環境を構築することも可能です。

Ab initio Basic Package	=	MedeA Bundle	+	VASP				
Interface Package	=	MedeA Bundle	+	VASP	+	MT	+	Interface Builder
Thermochemistry Package	=	MedeA Bundle	+	VASP	+	Phonon		
ThermomechanicalPackage	=	MedeA Bundle	+	VASP	+	MT + Phonon		
TSS Package	=	MedeA Bundle	+	VASP	+	TSS		
UNCLE Package	=	MedeA Bundle	+	VASP	+	UNCLE		
GIBBS Basic Package	=	MedeA Bundle	+	GIBBS				
Polymer Package	=	MedeA Bundle	+	LAMMPS Transport Bundle	+	Amorphous Materials Builder		

- MedeA Bundleは「MedeA Environment」および「InfoMaticA」を含みます。
- 各計算プログラム (VASP, GIBBS, LAMMPS) は、「Job Server/Task Server」を含みます。
- LAMMPS Transport Bundleは、「Diffusion」、「Thermal Conductivity」、「Viscosity」を含みます。

サポートプラットフォーム

O	S	: Windows 7/8/10(64bit), Linux(64bit)
C	P	U : Intel Core i5, i7, Xeon等 AMD Opteron等
メモ	リ	: 1core当り1~2GB程度 (VASP計算用には1core当り4GB以上を推奨します。)
H	D	D : MedeAのインストールには、5GB程度必要です。 計算結果の保存用に100GB以上の空き容量があることが望まれます。
Videoカード		: 128MB以上 (OpenGL2.1以上に対応)
Soundカード		: 必要ありません。
ネットワーク		: MPIで並列計算を実行する場合はGbit環境を推奨します。
ディスプレイ		: 画面解像度1024×800以上

基本環境

MedeA Environment ～基本統合環境～

MedeA Environment は、MedeAの基本環境です。構造モデルの構築や計算結果の解析を統一されたグラフィカルユーザインターフェース上で作業するための環境を提供します。
MedeA は、この基本環境 MedeA Environment を軸に、計算プログラムや物性値を推算するためのツールを組み合わせ、計算環境を構築します。

構造構築基本機能

グラフィカルに構造モデルを構築することができます。
基本的な操作（格子定数、元素の指定等）の他に、研究で利用する際に有効な様々な支援ツールを装備しています。

結晶構造構築機能 Structure Editor

結晶構造の基本的な構築・編集操作は、すべてこのツールで行います。全ての空間群をサポートし、構築したモデルの対称性を自動的に判別します。

空孔探索機能 Empty Space Finder

結晶格子間の隙間を探索するためのツールです。侵入型点欠陥モデルを検討するうえで、有用な情報を得ることができます。水素吸蔵合金材料での水素吸蔵サイトの探索等に有効です。

スーパーセル構築機能 Supercell Builder

指定した大きさにスーパーセルを構築することができます。

ナノ粒子モデル構築機能 Nanoparticles

「モデルのサイズ」、「形状（球状、筒状）」、「表面の処理方法」を指定することで、結晶構造を基にしてナノ粒子モデルを作成します。

高分子構造構築機能 Polymer Builder

リピートユニットから高分子モデルを構築できます。位置規則性や立体規則性も指定でき、柔軟なモデル構築に対応しています。

置換サイト探索機能 Substitutional Search

置換サイトを探索するためのツールです。置換サイトが複数ある場合、対称性を考慮して、全ての置換の組み合わせを検索します。

表面スラブモデル構築機能 Surface Builder

指定したミラー面を切り出し、表面スラブモデルを作成することができます。原子層数や真空層の大きさ、終端面の指定を容易に設定できます。

ナノチューブモデル構築機能 Nanotube Builder

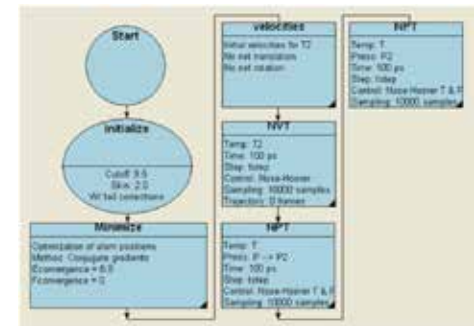
カイラルベクトルを指定して、ジグザグ型、アームチェア型等を自由に構築できます。単層だけでなく、多層ナノチューブも構築できます。

計算設定機能

各計算プログラムには専用のグラフィカルユーザインターフェースが備えられており、計算の設定・実行を簡便に行うことができます。さらに、フローチャート機能を利用することで、自由に計算フローを構築して実行することができます。

フローチャート機能

- ・ 構造構築機能
- ・ 各計算プログラムの計算設定・実行
- ・ 物性推算ツールの設定・実行
- ・ loopやwhile等の制御文
- ・ Tclによるコーディング
- ・ 表やファイルへの出力制御

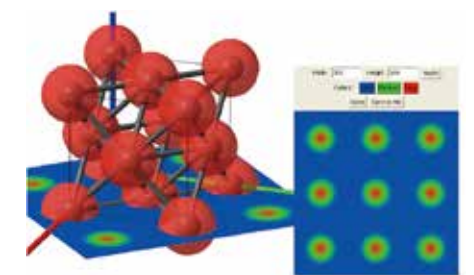


【フローチャート機能での計算フロー構築例】

解析機能

計算で得られた結果を描画します。
また、構築した結晶構造モデルの対称性を自動的に判別し、構造情報を表示する機能も装備しています。

- 構築した結晶構造モデルの解析
 - 組成、空間群、原子間距離・角度、各原子の配位数
 - 粉末X線回折パターンの計算
- グラフの描画
 - バンド構造図、状態密度図
- 電荷密度分布の表示
- アニメーション表示
 - 構造最適化計算の過程
 - 分子動力学計算の過程



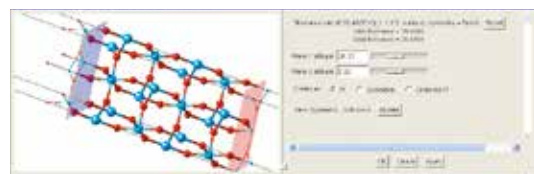
【電荷密度分布の表示例】

外部データのサポート

他のソフトウェアで使用するファイル形式をサポートしています。
これまでの研究で使用されていた構造データファイルを利用することも可能です。
また、外部ツールに出力する機能を装備しています。

- 構造データファイルの入力
 - VASP構造データファイル(POSCAR, CONTCAR)
 - 形式:XTL, Xmol, CIF, CAR
- 構造データファイルの出力
 - 形式:XTL, Xmol, CIF
 - 画像形式:Bitmap, PNG, TIFF
- SMILES文字列の入力
- Excelへの出力
 - バンド構造図、状態密度図
- VASP Data Viewerへの出力
 - 電荷密度分布、静電ポテンシャル
 - ELF(Electron Localization Function)
- POV-Rayへの出力
- モデル構造のVRML形式での出力

【Empty Space Finder 使用例：La-Ni系化合物における水素吸蔵サイトの探索】



【Surface Builder使用例: TiO (110) 表面スラブモデルの作成】



【2層ナノチューブモデルの構築例】

基本環境

InfoMaticA ～データベース管理ツール～

InfoMaticAは、データベースを管理するためのツールです。
結晶構造データベース(ICSD、PFB、NCD、PCD、COD)から結晶構造を検索し、詳細な構造情報を閲覧することができます。
検索した構造は、MedeA上にグラフィカルに表示することができます。これにより構造構築に要する時間を大幅に軽減できます。

機能

- 豊富な検索オプション
(例：組成式、含まれる元素、対称性での検索等)
- 詳細な構造情報の出力(格子定数、原子位置、組成等)
- 引用文献の表示
- 各原子の配位数のグラフ化
- 粉末X線回折パターンの計算
- ユーザ独自の構造データベース構築



【InfoMaticAでの検索例】

搭載可能な構造データベース

ICSD(Inorganic Crystal Structure Data)

- ・無機結晶データベース
- ・FIZ Karlsruhe による監修
- ・14万件以上の構造データを収録

NCD(NIST Crystal Data)

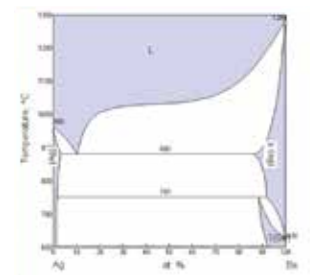
- ・無機、有機、金属等様々な固体のデータベース
- ・23万件以上の構造データを収録

PFB(Pauling File Binaries Edition)

- ・二元系無機結晶データベース
- ・二元系の相図
- ・2万8千件以上の構造データを収録

PCD(Pearson's Crystal Data)

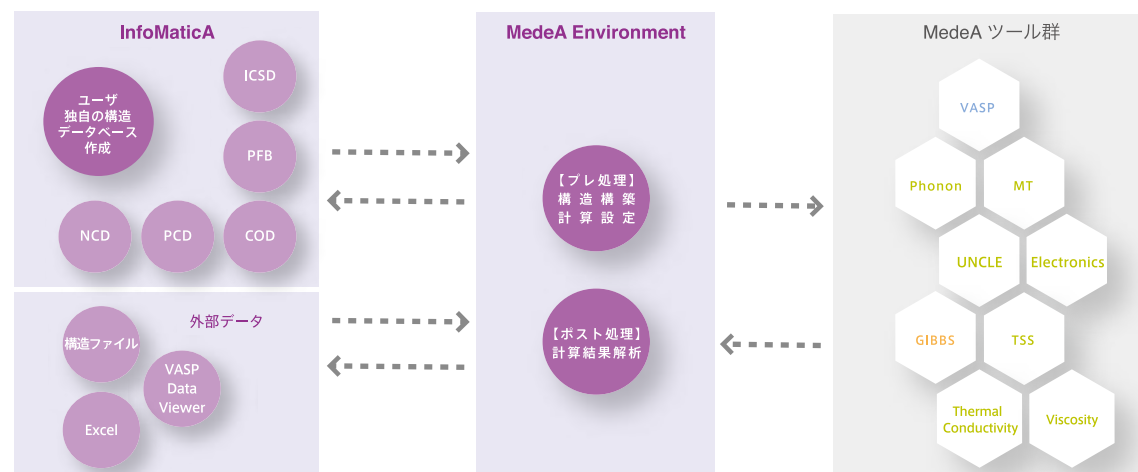
- ・金属、無機結晶データベース
- ・18万件の構造データを収録



【InfoMaticAによるPFBデータの相図表示】

COD(Crystallography Open Database)

- ・有機化合物、無機化合物、有機金属化合物や鉱物の結晶構造データベース
- ・29万件以上の構造データを収録



Job Server / Task Server ～ジョブ管理ツール～

MedeAは、ネットワーク技術を融合したジョブ管理機能を搭載しています。
独自のキューイングシステムにより、ネットワーク上のマシンを利用し、ジョブの割り当てや計算の回収を自動的に行います。
効率的な計算環境を構築するための強力なツールです。

Job Server

ジョブ管理を行うサーバーです。これまでの計算結果や履歴、現在実行中のジョブを管理することができます。全ての計算は一元管理されるので、ジョブ管理が簡便です。また、キューイングシステムにより、リモートマシンに計算を実行し、結果を回収する作業を自動的に行います。

機能

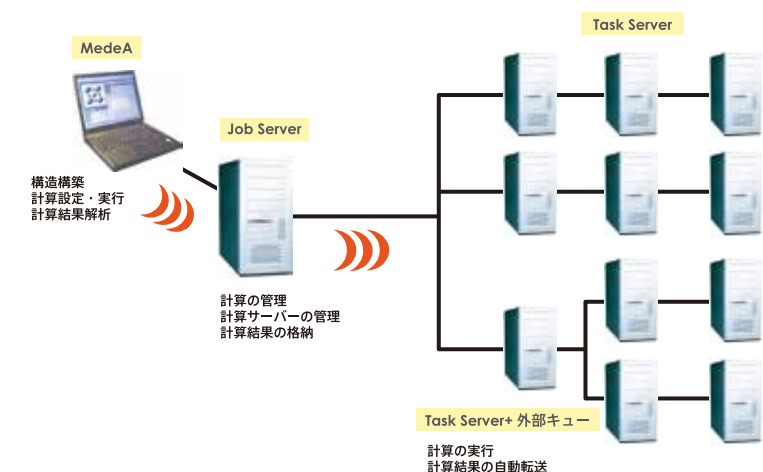
- Web ブラウザによるジョブの管理、結果の閲覧
- キューの作成、管理
- Task Server への計算の投入
- 計算結果の格納、データベースによる管理

Task Server

計算を実行するサーバーです。Job Serverから発信されたジョブを受信し、実際の計算を実行します。計算が終了すると結果を Job Server に転送します。

機能

- Job Server との通信により、ジョブを受信、実行。計算結果の転送。
- Web ブラウザによるタスク実行状況の確認
- 並列計算の設定



外部のキューイングシステムのサポート

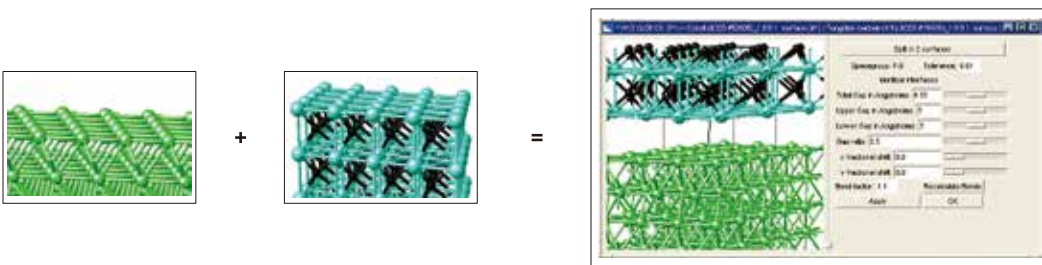
Job Server/Task Server は、Grid Engine、PBS、LSF といった外部のキューイングシステムと連携することもできます。
既存のシステムで構築されたキューを利用して、マシン管理を行うことが可能です。

構造構築拡張機能

Interface Builder ～界面モデル構築ツール～

2表面間で形成される界面の作成

界面モデルを構築するには、バルクモデルから表面を切り出し、2つの表面モデル間で周期境界条件を満たす格子の大きさや位置を探索する必要があります。これらの作業を手作業で行うのは非常に煩雑です。しかしながら、本ツールを利用することで、2つの表面モデルを用意するだけで、自動的に表面の対称性を考慮し、その表面間の界面モデルを網羅的に作成することができます。



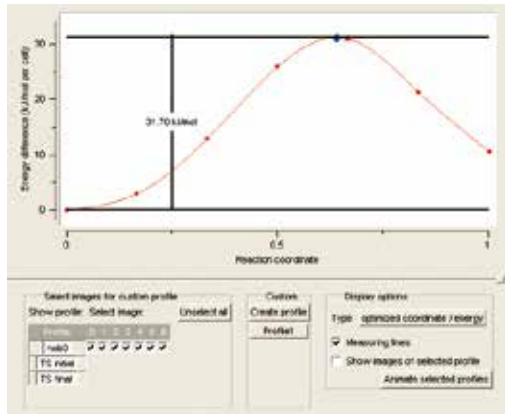
【2表面WC(001)/Co(001)間の界面作成】

Transition State Search ～遷移状態探索ツール～

TSSは、化学反応や拡散現象などにおけるエネルギープロファイルと遷移状態構造を探索するためのツールです。表面の吸着・解離反応や拡散のエネルギー障壁の評価に利用することができます。エネルギーと構造を評価するための第一原理計算プログラムとして、VASPを使用します。

機能

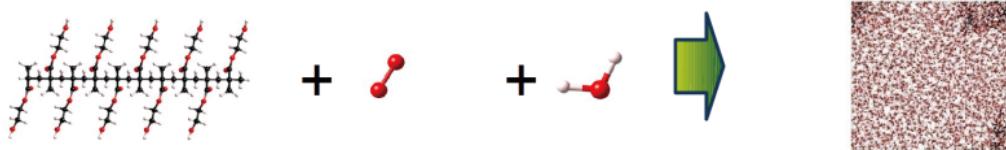
- 初期構造群の自動作成
- 遷移状態計算
 - Nudged Elastic Band法 (Climbing image法、Double nudging法)
- Dimer法
- 各構造での第一原理計算は、Job Server/Task Serverと連携して、分散処理（7ページ参照）
- エネルギープロファイル図
- 遷移状態構造の表示
- 反応経路での構造変化のアニメーション表示



【エネルギープロファイル表示例】

Amorphous Materials Builder ～アモルファスモデル構築ツール～

アモルファス構造モデルを構築します。指定した密度の凝縮相を作成することができます。バルクの重合体、ポリマーブレンド、電解質、低分子溶液など、様々なモデル構造を作成することができます。



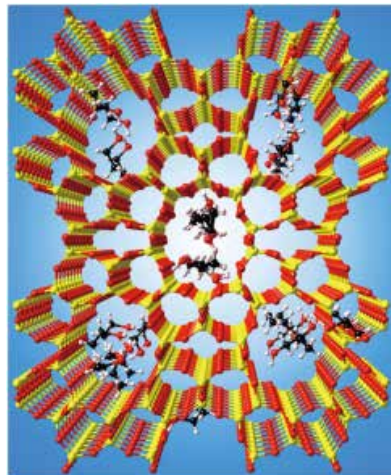
【アモルファス構造モデルの構築例】

Thermoset Builder ～熱硬化性樹脂モデル構築ツール～

エポキシ樹脂などの3次元架橋構造を密にもつ熱硬化性樹脂をモデリングするためのツールです。Amorphous Materials Builderと併用し、実験で観測される架橋密度を再現する歪の少ない架橋モデル構造を構築することができます。

Docking ～ドッキングツール～

ドッキングシミュレーションを行うツールで、ホスト-ゲスト構造モデルを自動的に計算して構築します。メトロポリスモンテカルロ法によってvan der Waals相互作用を即座に評価し、安定な構造を探索します。モンテカルロステップでのゲスト構造の変位や回転の大きさを指定することができます。表面モデルや多孔質モデルなどの構造構築に利用できます。



【ゼオライト格子へのエタノールのドッキング構造】

第一原理計算

MedeA-VASP ～第一原理電子状態計算プログラム～

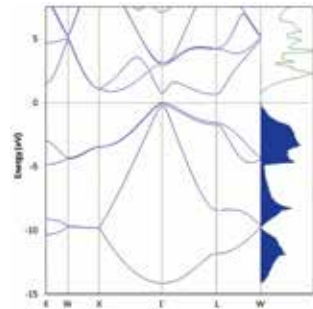
VASP¹は、密度汎関数法を用いた平面波-擬ポテンシャル法電子状態計算プログラムです。BlöchlのProjector Augmented Wave (PAW) 法によるポテンシャルライブラリを実装しており、高速で精度の高い計算を実現します。安定構造や遷移状態構造の最適化、拡散パスの検討、反応解析など様々な問題に適用されています。VASPは、MT、Phonon等の各ツールの計算エンジンとしても使用されます。

機能

- 内殻電子の取扱い
PAWポテンシャル
- 汎関数
密度汎関数
Van der Waals 密度汎関数 (optPBE-vdW等)
Meta-GGA (revTPSS, TPSS, M06-L, MBJLDA)
ハイブリッド汎関数 (PBE0, HSE06, B3LYP)
Screened exchange
Hartree-Fock
- 交換相関ポテンシャル
局所密度近似 (LDA)
一般化密度勾配補正 (GGA-PBE, GGA-PBEsol等)
- 分散力補正
DFT-D3, DFT-D2 (Grimme)
Tkatchenko-Scheffler
- 局在クーロン相互作用 (LDA+U)
- Monkhorst-Packの特殊点法によるk点の自動発生
- Brillouin領域での積分と占有電子の取扱い
Tetrahedron法 (Blöchlの補正)
Smearing (Gaussian, Fermi, Methfessel-Paxton)
- スピン分極、スピン軌道相互作用、ノンコリニア磁性
- GW近似
- 第一原理分子動力学計算
ミクロカノニカルアンサンブル (NVE)
カノニカルアンサンブル (NVT)
- 溶媒効果 (Implicit model)

物性

- 全エネルギー、生成エネルギー、力、応力テンソルの計算
- 格子定数と原子座標の同時緩和
- バンド構造
- 状態密度 (全状態密度、部分状態密度)
- 電荷密度、静電ポテンシャル
- スピン密度
- ELF (Electron Localization Function)
- 原子座標、静電場の変化に対する線型応答
誘電テンソル、ピエゾテンソル、ボリン有効電荷テンソル
- 弾性テンソル
- 光学スペクトル
誘電関数、屈折率、吸収係数、伝導率
- 超微細構造定数
- NMR化学シフト



【ハイブリッドポテンシャルHSE06を使用して計算したGeのバンド構造】



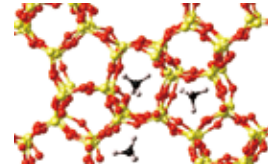
【VASP GUI】

力場計算

MedeA-GIBBS

～モンテカルロ計算プログラム～

GIBBSは、気体・液体の熱力学物性をモンテカルロ法により推算するプログラムです。低分子の液液・気体平衡計算や、低分子・長鎖のナノポーラス物質への吸着現象など、様々な系に適用することができます。



機能

- アンサンブル
カノニカルアンサンブル (NVT)
定圧アンサンブル (NPT)
グランドカノニカルアンサンブル (μ VT)
ギブスアンサンブル (定積、定圧)
- ポテンシャル
OPLS-UA, TraPPE
AUA (Anisotropic United Atom)
- 相互作用エネルギーの評価
分散・反発相互作用 (Lennard-Jones, Buckingham)
交差項には4つの混合ルールが適用可
(Lorentz-Berthelot, Kong, Waldman-Hagler, geometric)
静電相互作用 (Cutoff, Reaction Field, Ewald)
遠距離相互作用のカットオフに対する補正
- 分子自由度
剛体、フレキシブル、半剛体モデル
- 分子移動法
Configuration Biasedモンテカルロ法による長鎖の取り扱い
リザーバーバイアス法によるフレキシブルモデルの取り扱い

物性

- 単一層における熱力学物性
圧力、体積、密度、熱容量、熱力学関数等の温度変化
化学ポテンシャル
Joule-Thomson 係数
- 相平衡
気液平衡 (VLE)、液液平衡 (LLE)、気液液平衡 (VLLE)
蒸気圧曲線
- ナノポーラス物質への分子の吸着現象
吸着等温線

MedeA-LAMMPS

～分子動力学計算プログラム～

LAMMPS²は、サンディア国立研究所 (米国エネルギー省) によって開発された分子動力学計算プログラムで、世界中の様々な研究分野で利用されています。フローチャート機能 (5ページ) によるタスク制御で、平衡化計算を柔軟に設計でき、さらに各種物性ツール (14～15ページ) と組み合わせることで、熱伝導性や拡散等を評価できます。

機能

- アンサンブル
ミクロカノニカルアンサンブル (NVE)
カノニカルアンサンブル (NVT)
定圧アンサンブル (NPT)
- ポテンシャル
・ 有機分子・高分子用
OPLS-AA, PCFF, COMPASS (Published only)、
CFF91, CFF93, CVFF
・ 無機物・酸化物用
Inorganic, CVFF_AUG, BKS
・ 半導体用
Stillinger-Weber, Tersoff
- 相互作用エネルギーの評価
静電相互作用 (Cutoff, PPPM, Ewald)
遠距離相互作用のカットオフに対する補正

物性

- 純物質・混合物における流体の物性
・ 圧力、体積、密度、エネルギー

1. VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)はウィーン大学で開発された第一原理電子状態計算プログラムです。

G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54, 11169 (1996); Computat. Mat. Sci. 6, 15 (1996).

G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B 59, 1758 (1999).

2. S. Plimpton, J Comp Phys, 117, 1 (1995); <http://lammps.sandia.gov/index.html>

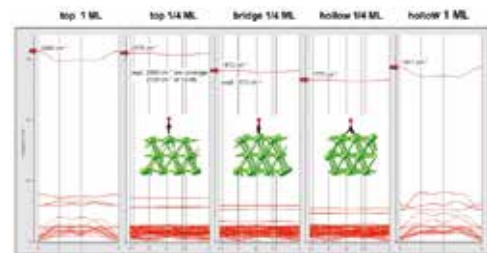
物性推算

MedeA-Phonon ～格子振動特性・熱力学物性評価ツール～

Phononは、格子振動特性を計算するためのツールで、振動エントロピーを取り入れた自由エネルギー等、熱力学物性を評価することができます。
MTツールと組み合わせて相安定性の検討、圧力下での計算、表面への適用など、様々な使い方が可能です。
Phononでは、ダイレクトアプローチ¹と呼ばれる方法で計算を行います。この方法では、十分な大きさのスーパーセルを構築し、そのスーパーセル内の各原子を動かし、その力の変化を第一原理計算で算出し、2次微分行列を構築、フォノン特性の計算を行います。
力の計算を行うための第一原理計算プログラムとしてVASPを使用します。

物性

- フォノン分散曲線
- フォノン状態密度
- 振動モードのアニメーション表示
- Γ点におけるフォノン振動の振動数と対称性の解析
- 零点振動エネルギー
- 定積熱容量、内部エネルギー、エントロピー、自由エネルギー
- IR/Ramanスペクトル



【Pt (111) 表面に吸着したCDの振動シミュレーション】

MedeA-MT ～弾性特性・熱力学物性評価ツール～

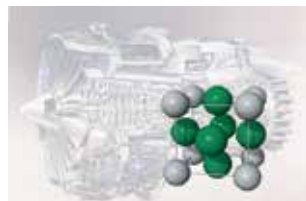
MT²は物質の弾性・熱力学物性を計算するためのツールです。
固体の格子振動を連続弾性体の弾性波動として近似(デバイ近似)し、固体の弾性を計算します。対象となる結晶構造に対して歪みを与え、その応力変化から弾性定数を計算、続いて諸物性の計算を行います。
応力を計算するための第一原理計算プログラムとしてVASPあるいは、分子動力学計算プログラムLAMMPSを使用します。

物性

- 弾性定数
- 弾性コンプライアンス行列と弾性定数行列
- 多結晶の弾性率 (Voigt, Reuß, Hill の方法³)
- 多結晶の音速
- デバイ温度
- 定積熱容量、エンタルピー、自由エネルギー
- Debye-Grüneisen 近似下での熱膨張係数

Moduli (GPa)	Experiment ⁴	Computed
Bulk	174	177
Shear(Voigt)	89	88
Young's	229	227

【Ni₃Alの弾性率】



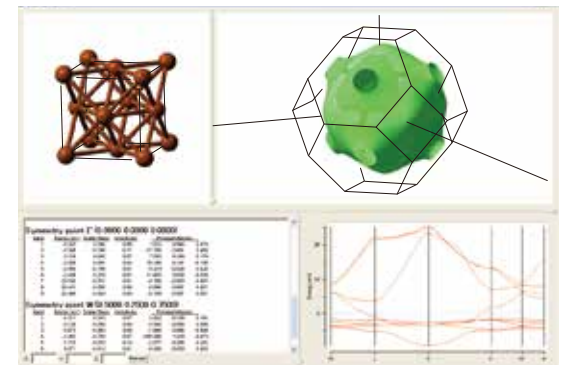
MedeA-Electronics ～電子状態解析ツール～

第一原理電子状態計算の結果を詳細に解析するためのツールです。
バンド構造を解析することで各種電子物性を計算します。
また、フェルミ面のグラフィカルな表示も可能です。

第一原理電子状態計算プログラムとして、VASPを使用します。

物性

- バンド構造図の3次元表示 (フェルミ面の表示)
- 逆格子空間上での任意の点における各バンドの有効質量の計算
- 電気伝導率、Seebeck係数、熱伝導率、ホール係数、電子比熱、Pauli常磁性磁化率



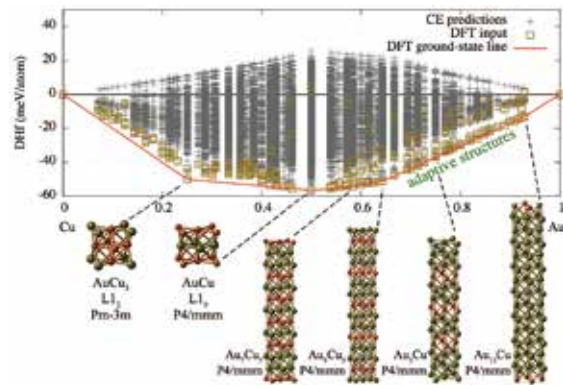
【Electronicsツールの表示例】

MedeA-UNCLE ～クラスター展開法ツール～

UNCLE (UNiversal CLuster Expansion)⁵は、クラスター展開法に基づいた物性推算ツールです。
合金や固溶体等といった不規則に構成原子が配列した物質の特性を第一原理計算法の精度を保ちながら、効率よく計算することができます。
第一原理計算プログラムとして、VASPを使用します。

物性

- 安定相の構造と基底状態ダイアグラム
- 空孔密度
- 溶解度
- 混合エネルギー
- 相安定性の温度・濃度依存性
- 秩序・無秩序転移温度



【Au-Cu合金の基底状態ダイアグラム】

1. K. Parlinski, Z. Q. Li, Y. Kawazoe, Phys. Rev. Lett. 78, 4063 (1997).
2. Y. Le Page and P. Saxe, Phys. Rev. B 65, 104104 (2002), Y. Le Page, P. Saxe and J. R. Rodgers, phys. stat. sol. (b) 229, 1155 (2002).
3. O. L. Anderson, J. Phys. Chem. Solids 24, 909 (1963).
4. S. V. Prikhodko, J. D. Carnes and A. J. Ardell, Metallurgical and Materials Transactions A, 30 A, 2403 (1999).

5. D. Lerch, O. Wieckhorst, G. L. W. Hart, R. W. Forcade, and S. Müller, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 17, 055003 (2009).

物性推算

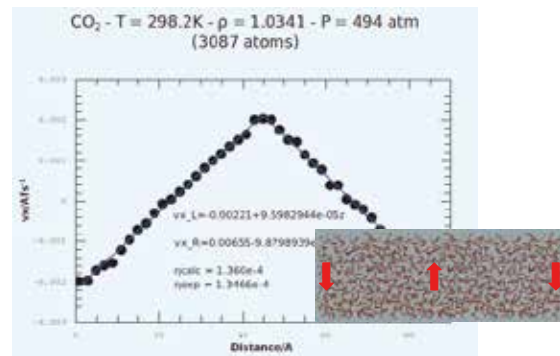
Thermal Conductivity & Viscosity ～熱伝導性・粘性評価ツール～

Thermal Conductivity・Viscosity は、古典的な分子動力学計算を基に、純物質・混合物の流体の熱伝導性・粘性を計算するツールです。

計算には分子動力学計算プログラムとして、MedeA-LAMMPS を利用します。

物性

- 熱伝導性 / 粘性の評価
- ・平衡系の分子動力学に基づく Green-Kubo の方法
- ・非平衡系の分子動力学に基づく Müller-Palthe の方法



【CO₂流体での計算例】

計算条件
P=494 bar, V=2.89×2.89×8.68 nm³,
T=298.2 K, ρ=1.0341 g/cm³

粘度
計算値 $\eta = 1.360 \times 10^{-4}$ Pa s
実験値 $\eta = 1.3466 \times 10^{-4}$ Pa s

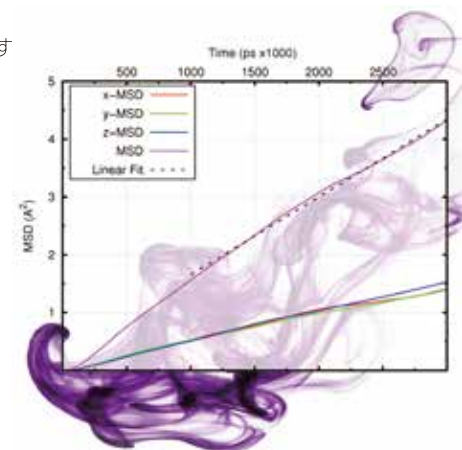
LAMMPS-Diffusion ～拡散係数評価ツール～

分子動力学計算を基に、純物質・混合物の流体の自己拡散係数を計算するツールです。
選択した原子の平均二乗変位を計算し、Einstein の拡散方程式より自己拡散係数を評価します

計算には分子動力学計算プログラムとして、MedeA-LAMMPS を使用します。

物性

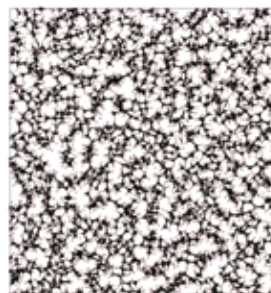
- 選択した原子の平均二乗変位
- Einstein 拡散方程式に基づく自己拡散係数



LAMMPS-CED ～凝集エネルギー密度評価ツール～

LAMMPS-CED (Cohesive Energy Density) は、分子動力学計算を基に凝集エネルギー密度を計算するツールです。
SP (溶解度パラメータ) 値の評価などに用いられます。

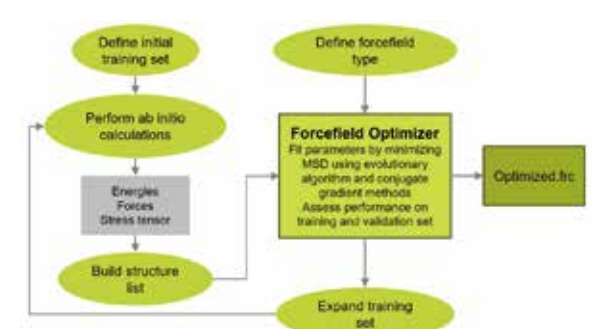
計算には分子動力学計算プログラムとして、MedeA-LAMMPS を使用します。



Forcefield Optimizer ～力場最適化ツール～

FFO (Forcefield Optimizer) は、第一原理計算の結果を基に力場パラメータを最適化するツールです¹。新規の系に対して力場パラメータを最適化して、力場計算によるシミュレーションを可能にします。

トレーニングセットを作成するために第一原理計算プログラム VASP を使用します。最適化された力場パラメータを検証するために分子動力学計算プログラム LAMMPS を使用します。



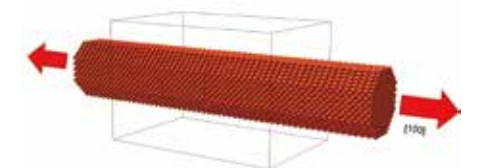
【力場パラメータ最適化のスキーム】

機能

- 第一原理計算分子動力学計算の履歴から各ステップの情報を抽出
：構造、エネルギー、力、応力
- どの力場パラメータを最適化するか選択可能
- 遺伝的アルゴリズムおよび最小二乗法によるパラメータの最適化
- 最適化された力場パラメータはファイルとして保存され、力場計算に利用可能
- 最適化可能な力場形式: Buckingham, EAM, PCFF, Tersoff

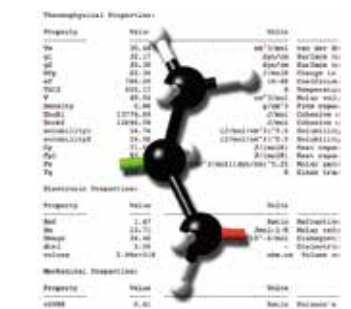
LAMMPS-EAM ～EAM力場パラメータ～

LAMMPS-EAM は、Embedded Atom Method (原子挿入法) による力場です。
金属を扱うのに適した力場で、第一原理計算で扱うには負荷の大きい大規模な系を分子動力学で扱うことができます。
Zhouらのパラメータ²をサポートしており、以下の金属を扱うことができます。
【Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al, Pb, Fe, Mo, Ta, W, Mg, Co, Ti, Zr】



P3C ～定量的構造物性相関ツール～

P3C (Polymer Property Prediction using Correlations) は、Bicerano の方法論³に基づいた定量的構造物性相関 (QSPR) ツールです。
MedeA がもつ単量体のライブラリから、高分子の各種物性 (ガラス転移点、凝集エネルギー、表面張力、誘電率、ヤング率等) を推算します。



1. Forcefield Optimizer の方法論については次の文献を参照ください。
R. Asahi, C. M. Freeman, P. Saxe and E. Wimmer, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 22, 075009 (2014).
M. Christensen, W. Wolf, C. Freeman, E. Wimmer, R. B. Adamson, L. Hallstadius, P. E. Cantonwine, E. V. Mader, Journal of Nuclear Materials 460, 82 (2015).
2. X. W. Zhou, R. A. Johnson, H. N. G. Wadley, Phys. Rev. B. 69, 144113 (2004).
3. J. Bicerano, Prediction of Polymer Properties, revised and expanded third edition, Marcel Dekker, New York, 2002.