材料設計支援プラットフォーム　SciMAPS

SciMAPS 4.4 リリース

SCIENOMICS
delivering science

SciMAPS は、外部プログラムとの連携を前提とした、拡張性の高い設計思想を持つ材料設計支援プラットフォームです。SciMAPS には、Quantum（量子力学計算）、Classical（力場計算、メソスケール計算、特定物性解析ツール）、Engineering（構造物性（活性）相関、熱力物性計算）の 3 つのパッケージがあり、目的に応じて導入します。各パッケージにはその分野で定評のある計算プログラムが利用できますので、研究目的に合わせて使い分けることが可能です。本稿では、1 月にリリースされました SciMAPS 4.4 の新機能について紹介します。

Cassandra

新規に Cassandra を利用できるようになりました。Cassandra は米国ノートルダム大学の Maginn らのグループにより開発されたモンテカルロ法計算プログラムです。NVT、NPT、μ VT、ギブス各アンサンブルのモンテカルロシミュレーションが可能です。原子スケールで相平衡のシミュレーション、吸着特性の計算に利用できます。

フラグメントライブラリを利用した独自の Configurational bias Monte Carlo 法[1] により効率の良い構造サンプリングが可能となっています。フラグメントライブラリは与えられた系を構成する分子構造から自動的に作成され、分子配置のサンプリング時に利用されます。また、既存のモンテカルロ法の計算プログラムの Towhee が並列計算に対応していないのに対して、マルチコアによる並列化計算に対応しており、高速な計算が可能となっています。

Mesophase DPD Builder

メソスケールの散逸粒子動力学用の構築ツールを見直し、Mesophase DPD Builder として追加されました。ランダム、ラメラ、レイヤー、ベシクル、パーティクル（複数のビーズの集合体）などの特定の構造からなるアモルファス系の作成が可能となりました。

セル内に入れる DPD ビーズからなる分子の分子数比を指定し、上方、下方の層に配置する分子種を指定して系を構築します。図 1 の例ではセルロース（紫）が上方に、オイル（緑）が下方に配置され、他の種類の化学種である界面活性剤（赤＋黄）と水（水色）がランダムに配置されています。また、上方、下方に配置する分子のコンフォメーションについてはランダム、直線状を選択できます。

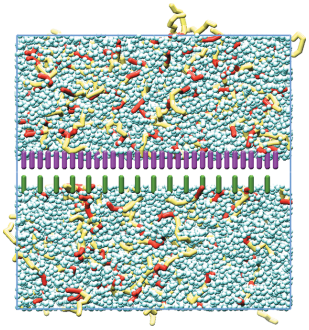

図 1. Mesophase DPD Builder による構築例

新しい物性推算機能とチュートリアル

LAMMPS を利用した分子動力学計算による熱伝導率推算の機能が追加されました。熱伝導率推算は Langevin 法による非平衡分子動力学を利用した方法を採用しています。シミュレーションでは、熱を与える領域を直方体の両端に、与えられた分と同じだけ熱を引き去る領域を中央部に設けることで、エネルギー一定を保ちます（図 2）。シミュレーションにより得られた各領域の温度を調べることで、熱伝導率を推算します。

チュートリアルには熱伝導率推算の事例に加え、粘度推算の事例も追加されました。粘度推算の事例では SLLOD 法[2] による非平衡分子動力学を利用しています。SLLOD 法ではせん断速度を XY 面上に与え、その各原子の持つ速度平均の Z 軸方向に対する分布情報から粘性を計算します。いくつかの異なるせん断速度に対する粘度を計算することでゼロせん断粘度を推算しています。

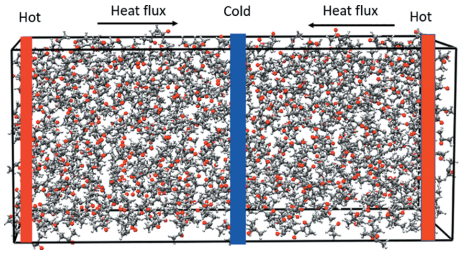

図 2. 熱伝導率計算の熱源の配置

その他

- 記述子計算プログラム alvaDesc のインターフェースが追加されました。
- スケールごとに重複して用意されていた表示、操作に関するアイコンツール群を統一しました。
- 表示に関する機能が向上し、大きな系についても高速な表示が可能になりました。

参考文献

1）Shah, J. and Maginn, E. J. *J. Chem. Phys.*, **2011,** *135,* 134121
2）Daivis, P. J. and Todd, B. D. *J. Chem. Phys.*, **2006,** *124,* 194103