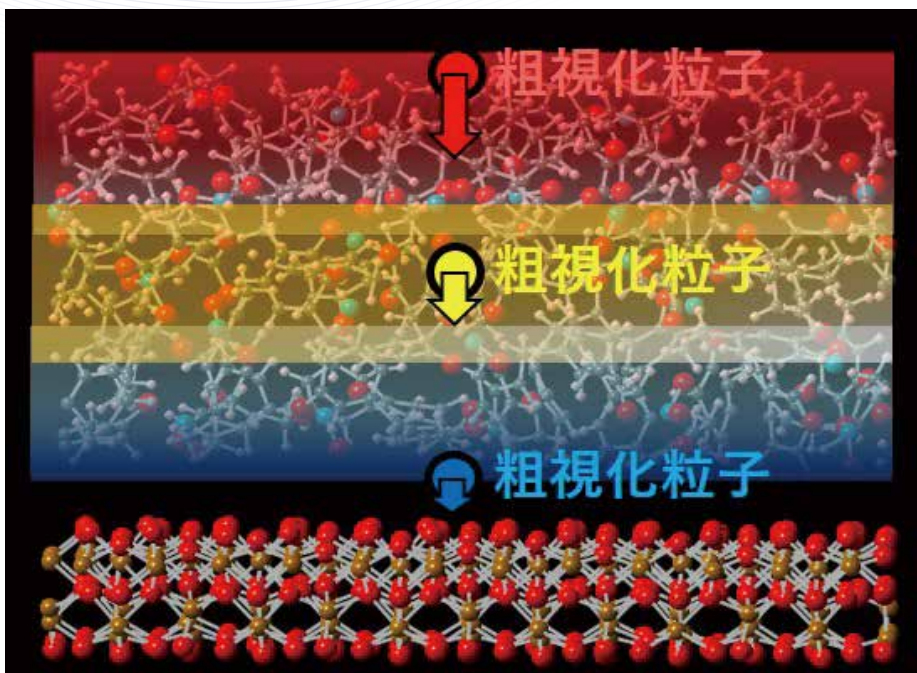


界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ(Ⅱ) (HybridQMCLT)

シミュレータ概要

- ▶ 本シミュレータは、ハイブリッド量子古典計算を行うコードで、界面に対してマクロなシアーストレスを印加することが可能となるプログラムです。HybridQMCLTでは、大規模で複雑な対象系において、電子レベルでの計算が必要な領域にだけオーダーN型の実空間グリッド電子状態計算コードを適用することで、原子・イオンのダイナミクスを高速に計算します。さらに、実際的な設定で、金属系と有機分子系との接触面での相対運動に伴う化学反応をシミュレートできます。



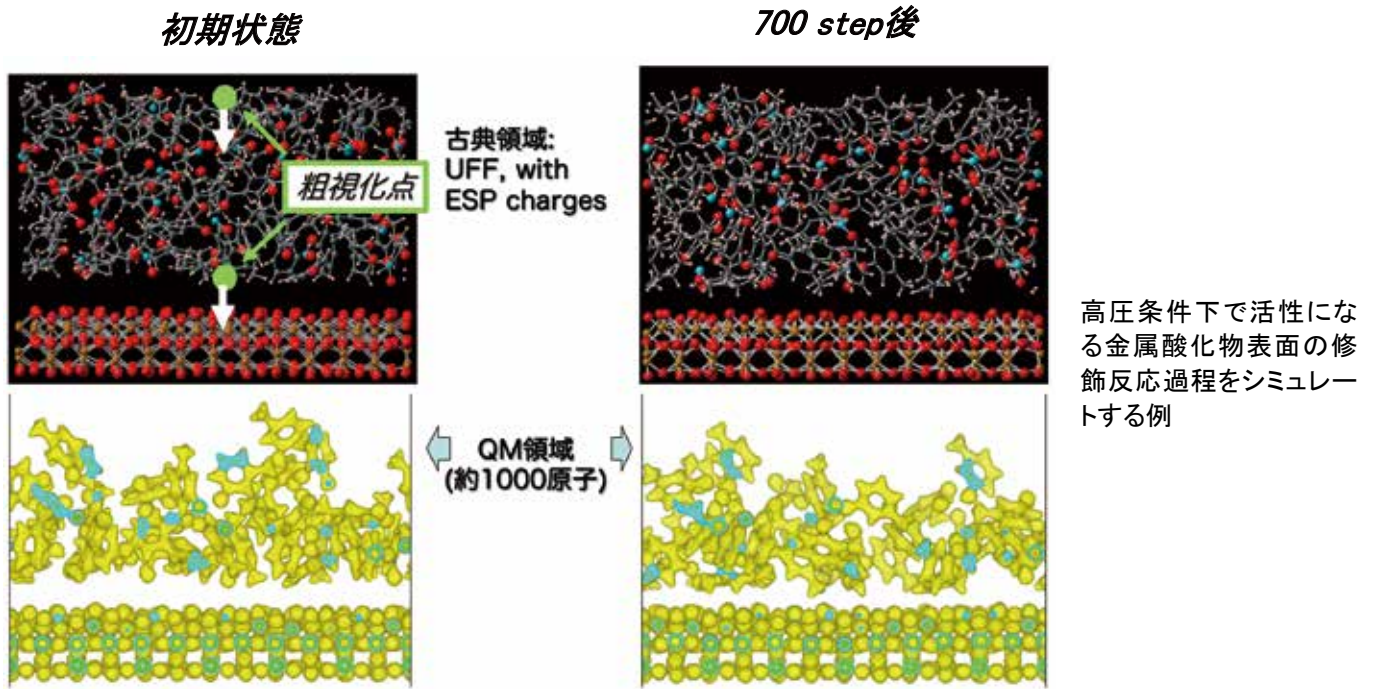
有機分子系の金属基板系への押擦運動を仮想的な粗視化粒子を通じて表現し、接触面近傍の領域をDFTで計算することで、相対運動に伴う化学反応をシミュレートします。

拡張機能

- ▶ 有機分子系のマクロな運動や変形を、複数個の仮想的な粗視化粒子の運動を通じてシームレスに制御する機能を追加
- ▶ 古典原子間ポテンシャルを変更することで、様々な有機分子に適用可能となる有機分子系用モジュールを実装

想定用途

- ▶ 固液界面で生じる修飾・腐食反応ダイナミクス
- ▶ 複雑な接触界面が誘起する特異な物性値の予測
- ▶ 磨耗過程の原子ダイナミクス



動作環境

- ▶ Fortran及びCコンパイラ、MPI、BLAS、ScaLAPACKライブラリーが必要
- ▶ 最新のメニーコア型スパコンでの運用が望ましい

ライセンス・配布方式

- ▶ HybridQMCLTの利用規約に従う。詳細は問合せ

—謝辞—

本シミュレータの拡張部分は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(P16010)により開発されたものです。

【連絡先】超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

【シミュレータ配布問合せ窓口】u2m-sim-ml@aist.go.jp

2020.04