

令和 2 年 6 月 9 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05003

研究課題名（和文）クラスター衝突過程のシミュレーションと大規模原子座標データ協働モデルの研究

研究課題名（英文）Collaborative data management environment for large scale atomic simulations of cluster impact

研究代表者

青木 学聡（Aoki, Takaaki）

京都大学・学術情報メディアセンター・准教授

研究者番号：90402974

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,600,000円

研究成果の概要（和文）：オープンサイエンス、研究データ管理の視点から、イオンビーム科学・工学における巨大原子座標を中心とした各種データを扱うための共通基盤の研究を行った。長年の歴史を持つ古典的なイオン衝突シミュレーションの互換性の維持と利便性の向上のため、入出力データに対するプリ・ポストプロセスの開発を行った。また、従来と単原子イオンビームとは異なるクラスターイオンの衝突シミュレーションの事例を収集、整理し、クラスターイオン衝突における解析手法を提示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

他の分野と同様、イオンビーム科学・工学分野においても計算機シミュレーションは、衝突素過程解析のモデル化から、製造工程におけるプロセス最適化まで、各々の目的に応じて広く用いられており、得られるデータを効率的に整理し、多様な実験や、他のシミュレーション結果との比較、検討を有機的に実施できる環境構築がより重要視されるようになっている。本研究では、FAIR原則に従い、古くからあるシミュレーションプログラムの互換性と利便性の向上、複雑な衝突過程を有するクラスターイオンのシミュレーションの可視化と解析手法を通じて、オープンサイエンス時代における研究データ管理手法の事例を示した。

研究成果の概要（英文）：The platform to manage large-scale atomic coordination data was developed with the viewpoint of research data management and open science. The pre- and post-process software for legacy simulation program for ion beam science and engineering were developed for sustainable and improved use. Additionally, the simulation data of the cluster ion beam impact were collected, organized, and analyzed to characterize the difference from that of the conventional ion beam.

研究分野：情報科学

キーワード：クラスターイオンビーム MARLOWE 研究データマネジメント 分子動力学法

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

多数の原子(または分子)の巨大集合体であるクラスターを加速し、標的材料に衝突させるクラスターイオンビーム法では、クラスター標的材料表面での高粒子密度、高エネルギー密度衝突に起因する照射領域の大規模な変形や、高い励起反応などが期待される[1]。クラスターイオンビームの衝突過程には、従来の単原子イオンビームの単純な重ね合わせでは説明できない非線形性を含むため、その衝突モデルの構築には、多数の単原子イオンビーム照射実験・計算機シミュレーションとの幅広い比較が必要となる。他の分野と同様、イオンビーム物理・工学分野においても計算機シミュレーションは、衝突素過程解析の為にモデル化から、製造工程におけるプロセス最適化まで、各々の目的に応じて広く用いられている。また、実験、プロセス手法の高度化に沿う形で、計算機シミュレーションにおいても規模の拡大が進んでおり、得られるデータを効率的に整理し、多様な実験や、他のシミュレーション結果との比較、検討を有機的に実施できる環境構築がより重要視されている。このような研究データの取扱いに関する全般、すなわち研究データマネジメントは、オープンサイエンス推進や、研究公正の維持の観点から、学術全体の大きな興味となっている。

2. 研究の目的

イオンビーム物理・工学における素過程は、入射及び標的材料の原子配置に還元される。逆に言えば、大規模な原子座標データよりボトムアップ的に結晶や欠陥構造等を定義し、それらの特徴を分析することで、イオンビーム照射効果のモデル化を進めることが可能となる。また、データに付与するメタデータを整備することで、実験やシミュレーションの比較が効率的に行われる必要がある。本研究では、イオンビーム物理・工学における基本的なシミュレーションプログラムの入出力インターフェースの分析、改善を通して、イオンビーム物理・工学におけるデータマネジメント基盤整備を進める。あわせて、巨大クラスターイオンの固体表面への衝突シミュレーション結果を収集し、一般の単原子イオンビーム衝突との違いを、巨大原子座標データから派生する種々の特徴量の抽出とそれらの比較により検討した。

3. 研究の方法

研究データマネジメント、オープンサイエンスの文脈では、FAIR 原則が提唱されている[2]。すなわち、Findable(データが見つけれられる)、Accessible(データにアクセスできる)、Interoperable(相互利用できる)、Re-usable(再利用できる)ことでデータの価値を高めることができる、とされている。特に長年利用されてきたシミュレーションプログラムや実験手法については、その互換性の維持が課題となる。本研究では、二体衝突シミュレーションプログラムとして利用されているMARLOWE[3]を取り上げ、そのプリプロセス、ポストプロセスの整備を進めた[4]。

クラスターイオンと固体表面の衝突過程では、複数の入射原子と標的原子との間で、同時に多数の相互作用が発生する。したがって、その衝突過程には、2体衝突モデルを適用できず、系内に存在するすべての粒子の運動を逐一追跡する、分子動力学法(Molecular Dynamics, MD)を採用した[5]。

4. 研究成果

伝統的なシミュレーションソフトウェアのである MARLOWE のプリ・ポストプロセスの開発では、MARLOWE はシミュレーションに必要なパラメータセットを Fortran Namelist 形式で作成し、コマンドラインから実行する。プリプロセスでは、パラメータセットを編集する GUI を提供するとともに、パラメータセットを JSON で管理できるようにした。一方、MARLOWE 本体からの出力はページプリンタを想定し、一定のデータブロックの途中であっても、改ページコードとページヘッダが挿入される仕様となっている。また、多様な計算オプションに反し、出力形式に統一性が保たれていない。これに反し、CPU とはじめてとする計算機リソースの進歩に従い、シミュレーションプログラムから出力されるデータ量は膨大となり、目視ではなく機械可読な構造化されたデータとして整理される必要がある。開発したパーサでは、MARLOWE プログラムからの出力データ構造を拡張バックス-ナウ記法(Extended Backus-Naur Form, EBNF)で記述することで、出力ファイルの安定かつ厳密な解析を可能とした。さらに、MARLOWE ソースコードの比較により、それぞれの出力が発生する条件をメタ情報としてあわせて記載することで、より高速、最適化されたパーサへの漸進的な移行が実現できる。さらに、MARLOWE と同様広く利用されているイオン衝突シミュレーションプログラムである、SRIM[6]についても同様にプリ・ポストプロセスプログラムを作成している[7]。このようにレガシーなシミュレーションソフトウェアの入出力を共通のツールキットで仲介することで、ソフトウェアの利便性を維持するとともに、シミュレーションプログラム本体を入出力の互換性を維持しつつ新しいプラットフォームに移行することの助けになる。また、シミュレーションソフトウェア同士のデータ互換性を持たせ、その共通部分をイオンビーム科学・工学におけるメタデータとして共有することで、シミュレーションとそれに対応する類似の実験手法、さらには異なる実験手法間を結びつ

け、データの可用性を高めるモデルを検討する基盤を整備した。

クラスターイオンの衝突シミュレーションでは、これまで数多く実施されてきた、単純な平坦面とは異なり、大規模な構造を持つ標的にクラスターを衝突させるシミュレーションを実施した。Si 基盤上に高さ 100nm、幅 10nm、奥行き 50nm の構造物が付着した標的材料を用意し、これに対し、20 万原子の Ar 原子の集合体である Ar_{200k} クラスターを衝突させる。この時、クラスターの中心が基盤と構造物の接合部を目指し、鉛直方向に対し 5 度の角度で入射する。また、クラスターの総加速エネルギーは 60keV、すなわち個々の Ar 原子は 0.3eV の運動エネルギーを持つ。過去の実験及びシミュレーションより [8, 9]、このような巨大、低速クラスターを平坦面に鉛直に入射させた場合、衝突表面にダメージは生じず、極表面に付着した不純物を除去する効果が得られることが明らかにされている。今回、図に示すシミュレーション結果では、クラスターはそのまま、構造物の側壁を滑り、多くのクラスター構成原子が基盤と構造物の接続箇所へ衝突したのち、基盤及び構造物の壁面に沿って拡散する衝突過程が観察された。また、この過程においてクラスターの一部は構造物の端点に衝突するが、構造物そのものは大きな変形を受けず、また、構造物の剥離や倒壊等は生じなかった。このように、巨大・低速なクラスターイオンビームを用いることで、異方性を持つ構造材料に対するドライクリーニングプロセスに対する知見を得た。

参考文献

- [1] 松尾 二郎, 藤井 麻樹子, 瀬木 利夫, 青木 学聡, 「クラスタービーム技術の新展開」, 精密工学会誌, 2016, 82 巻, 4 号, p. 309-314, DOI:10.2493/jjspe.82.309
- [2] 「データ共有の基準としての FAIR 原則」, DOI:10.18908/a.2018041901
- [3] “MARLOWE 15b, Computer Simulation of Atomic Collisions in Crystalline Solids”, <http://www.oecd-neo.org/tools/abstract/detail/psr-0137/>
- [4] “MARLOWE User Interface”, https://bitbucket.org/marlowe_ui/
- [5] “LAMMPS Molecular Dynamics Simulator”, <https://lammps.sandia.gov/>
- [6] “SRIM - The Stopping and Range of Ions in Matter”, <http://www.srim.org/>
- [7] “SUZU Yet another UI program for SRIM parameter input program”, <https://github.com/takaakiaoki/suzu>
- [8] K. Dobashi, K. Inai, M. Saito, T. Seki, T. Aoki, J. Matsuo, Ultrafine Particle Removal Using Gas Cluster Ion Beam Technology, IEEE Trans. Semicond. Manuf. 26 (2013) 328–334. doi:10.1109/TSM.2013.2268871.
- [9] T. Aoki, T. Seki, J. Matsuo, Molecular dynamics simulations study of nano particle migration by cluster impact, Surf. Coatings Technol. (2016). doi:10.1016/j.surfcoat.2016.04.053.

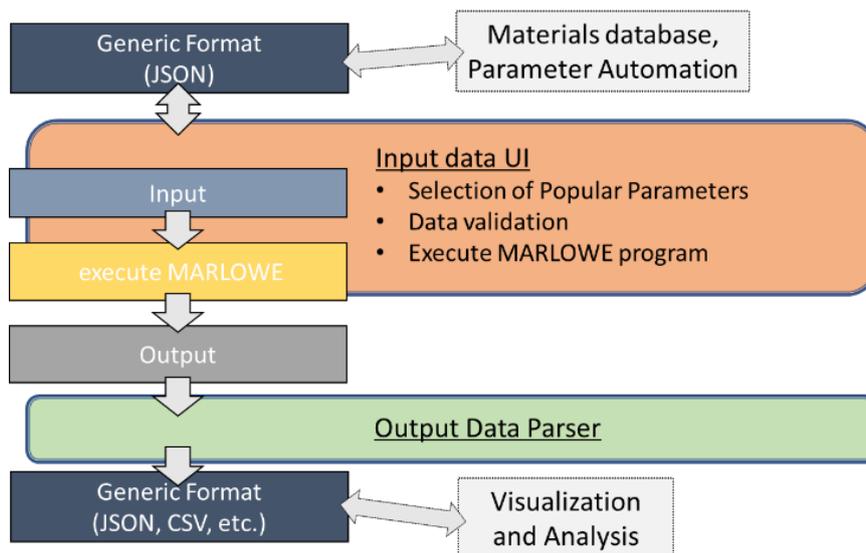


図 1: Marlowe のプリ・ポストプロセス

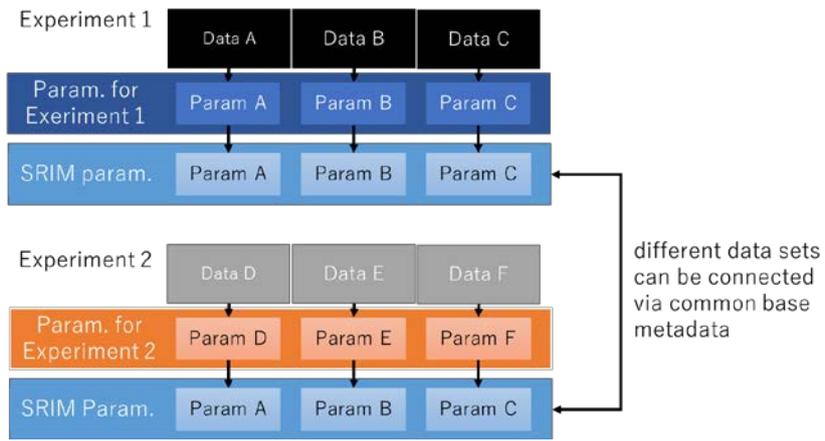


図 2: 基本的なイオン衝突シミュレーションのパラメータをメタデータとするモデル

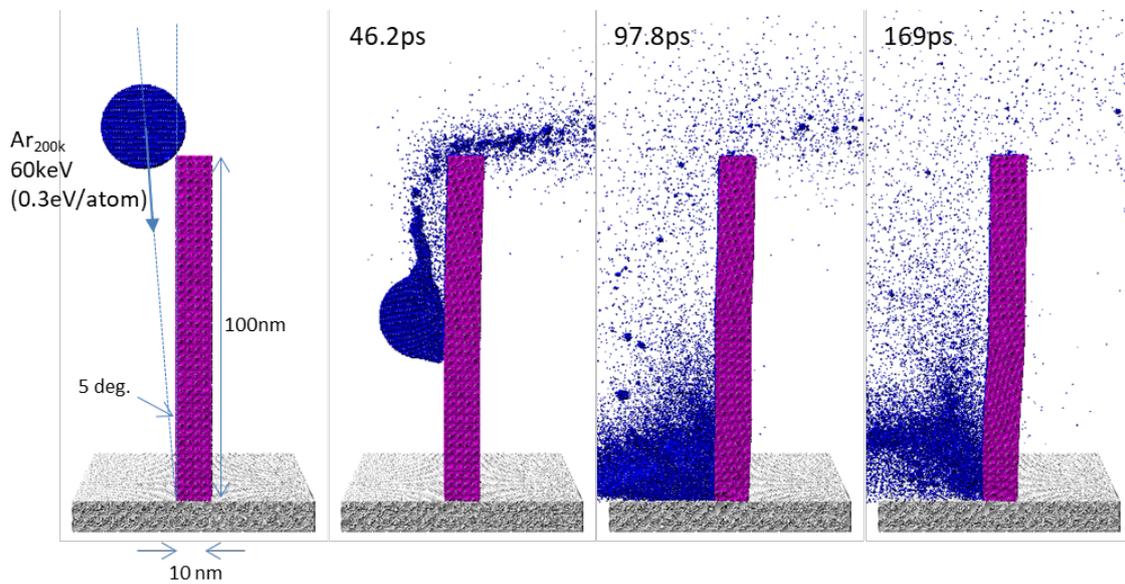


図 3: 大規模な構造を持つ標的的材料への巨大クラスターイオンの衝突シミュレーション

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 青木学聡
2. 発表標題 伝統的イオン衝突シミュレーションプログラムの改善手法の検討
3. 学会等名 応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 青木学聡
2. 発表標題 イオンビーム研究におけるデータマネジメント方針の予備的検討
3. 学会等名 第65回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2017年～2018年

1. 発表者名 Takaaki Aoki
2. 発表標題 Design of research data management environment for ion beam physics and engineering
3. 学会等名 2019 MRS-J Annual Meeting
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 Takaaki Aoki
2. 発表標題 Research ecosystem and legendary scientific software
3. 学会等名 ELEVENTH INTERNATIONAL MEETING ON RECENT DEVELOPMENTS IN THE STUDY OF RADIATION EFFECTS IN MATTER. (国際学会)
4. 発表年 2019年～2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

SUZU - Yet another UI program for SRIM
<https://github.com/takaakiaoki/suzu>
Marlowe User Interface (marlowe_ui)
https://bitbucket.org/account/user/marlowe_ui/projects/MUI
SUZU - Yet another UI program for SRIM ...
<https://github.com/takaakiaoki/suzu>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----