

## 自己評価報告書

平成23年 5月10日現在

機関番号：15101

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2008年度～2011年度

課題番号：20740215

研究課題名(和文) 非経験的手法からの系のモデル化手法の研究

研究課題名(英文) Study on modelling methods for systems of atomic structures based on ab-initio simulation methods

研究代表者 吉本 芳英 (YOSHIMOTO YOSHIHIDE)

鳥取大学 工学研究科 准教授

研究者番号：80332584

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学 数理物理・物性基礎

キーワード：計算物理 モデル化 物性理論

## 1. 研究計画の概要

非経験的な電子状態計算による原子・分子シミュレーションには高精度に物性を予測する能力があるが、より原子数の大きな系の有意義な応用にはこの手法の計算コストの大きさに起因する4つの限界(空間、状態数、時間、電子相関)を同時に乗り越える必要がある。これは計算機能力の向上のみでは達成できない。本研究の目的は、これらの困難のうち、主として状態数、時間の2つの限界を、multicanonical ensemble法に基づく新しい系のモデル化手法を、multicanonical法自体の拡張と連携させることによって非経験性による系の描写の正確さと精度を維持しつつ打開することである。具体的な目的は以下の三つである。

(1) 凝縮系の結合様式は金属結合、イオン結合、分子結合、共有結合に大別できる。

代表者の既存の業績では共有結合(シリコン)のみが扱われているが残り3つによる物質もそれぞれの多様な物性を持っている。したがって共有結合による物質以外について申請者が提案する手法を利用可能にする。

(2) multicanonical ensemble法は効率の良い状態空間探索法として知られているが、万能ではなく、実際、代表者の研究では、これを状態密度を多変数へ拡張することではじめてシリコンの液体結晶間の転移温度をヒステリシスを避けて精密に計算することができている。この拡張はシミュレーションの効率を左右する重要な要素であるので、目的(1)にあげた系についてそれぞれ適切な拡張を検討する。

(3) (2)の適切な拡張は再現したい系の変化にも依存する。この拡張には相変化(状態数の問題)のみならず、化学変化(時間の問題)

をも含めることができる。時間の問題は大変重要であるから後者についても研究する。

これらに加えて関連する第一原理計算プログラムなどの研究開発も行う。

## 2. 研究の進捗状況

目的(1)については、イオン結合系(MgO)と金属結合系(CuZr系)の二種類についての研究を実施した。

MgOの融点は非常に高いため、電子系の熱励起効果が無視できない。そこで、この課題に対応する手法を開発した。

そして融点、融解熱、融解時の体積変化の体積変化を計算したところ、0GPaでモデル化を行いそれをその他の圧力で用いて得た結果と、各圧力でそれぞれモデル化した結果はほぼ同等となり、この手法がうまく機能することが確認できた。

CuZr系については、用いるモデル原子間ポテンシャルとして、Embedded Atom Model型であって原子間距離が小さい所での発散を制御したものをを用いることでうまくモデル化できることが判明した。このモデルはCu, Zrの純粋系とCuZrの1:1系の融点を100K以内の誤差で再現した。

残る分子系については最終年度に水分子系を扱うための準備としてKumagai, Kawamuwa, Yokokawaらによる水分子の解離を許す原子間ポテンシャルの力場計算プログラムの開発を行っている。

目的(2)については、MgOの多数原子系をシミュレートする際に秩序パラメータをSiのそれから改良した。この改良した秩序パラメータをCuZr系および水分子系にも使用している。

目的(3)の時間の問題については、生成した

モデルポテンシャルによってCuZr系の急冷によるガラス化をシミュレートし、その結果を検証した。その結果、Cu<sub>60</sub>Zr<sub>40</sub>のCuが多い組成ではX線実験による二体相関関数を良く再現することができ、特にr=0.3nmのピークの右側に見られる肩をある程度再現できた。一方でCu<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub>やCu<sub>45</sub>Zr<sub>55</sub>のZrが多い組成では、この肩が実験では大きく成長してピークになっていくのに対して、依然として肩のままである食い違いがあった。

その他に第一原理計算プログラムの開発を行い、新しく更新された物性研究所スーパーコンピュータ システム B において、pyrope 640 原子系の計算が 256CPU までスケールするなど、高性能な物ができた。

### 3. 現在までの達成度

③「やや遅れている」と判断する。理由は、当初計画では3年目で予定していた水分子系に関わる仕事が4年目にずれ込んでいるためである。2年目に予定していた金属系に対する研究において、良いモデル原子間ポテンシャル形を見いだすのに時間がかかったため、この次に予定していた水分子系の仕事に遅れが発生した。

### 4. 今後の研究の推進方策

東日本大震災の影響で使える計算資源が大きく減少したため、第一原理計算を行いくなくなっているのが大きな課題である。

その一方で水分子系に対する力場計算プログラムの用意はできているので、まずこの系に対する研究を早急に進め、化学反応に関する時間依存の問題の研究は優先度を大きく下げることとする。

そして水分子系の課題において超臨界水の中のプロトンの移動の問題も扱うことで時間の問題に関する知見を同時に得ることを検討する。

また不足する計算機資源は震災の影響がない西日本のもので補うことを試みる。

### 5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計2件)

①吉本 芳英, 第一原理計算とHPC、情報処理学会 研究報告、査読なし、Vol. 2010-HPC-125 No.4、2010、1-7

②Yoshihide Yoshimoto, Melting of MgO Studied Using a Multicanonical Ensemble Method, J. Phys. Soc. Jpn., 査読あり, Vol. 79, 2010, 034602

[学会発表] (計9件)

①Yoshihide Yoshimoto, Model inter-atomic potential for Cu-Zr system generated using a multicanonical simulation combined with a first-principles calculation, March meeting of the American Physical Society, 2011年3月24日 Dallas, TX, USA

②吉本 芳英, 付加機能ソフトM2TDの紹介, 文部科学省「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発, 2011年2月23日, 甲南大学ポートアイランドキャンパス

③Y. Yoshimoto, First-principles calculations combined with multicanonical ensemble method, Scientific Impacts and Opportunities in High Performance Computing, Young Investigators Symposium, 2008年10月13日, Oak Ridge National Laboratory, TN, USA

④吉本 芳英, 第一原理計算とマルチカノニカル法でみる物質構造相変化, 日本物理学会2008年秋季大会 シンポジウム講演, 2008年9月22日, 岩手大学

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]