



分類	ナノシミュレーション
キーワード	ハイブリッド計算
開発者	中村美道、宇田毅、大野隆央
作成年月	2004年12月
コード名	CAMUS
使用言語	Fortran90

#### ◇ハイブリッド計算プログラム CAMUS

ハイブリッド計算プログラム CAMUS は、リンク原子(分子)法に基づくハイブリッド法を用いて、シリコン基盤を想定した大規模系シミュレーションを高精度に、かつ効率良く行なうプログラムである。CAMUS は、プログラムソース、使用説明書、および基本的な計算結果などの資料とともに、「フリーソフトウェア」として公開予定である。

現在公開中の第一原理 (FP) 計算プログラム PHASE は、物質の原子・電子構造を高精度に計算可能なことから、大規模ナノ構造や、有限温度での多数原子の動的振舞い・反応解析への応用も期待されるが、膨大な計算時間消費という事態に直面する。そこで我々は、PHASE をサブルーチンとして CAMUS に組み込み、活性中心となるような重要な領域に対してのみ、FP 計算を行なう。その周囲を強結合 (TB) 計算領域で囲み、さらにその周囲を古典分子動力学 (MM) 計算の大領域で囲む。これにより、周辺大領域は熱浴としての役目を果たしつつ、FP 領域とスムーズに接続する。

#### ◇プログラムの概要

- (1) 仮想分割された系の各領域に対し、FP 計算、TB 計算、MM 計算の選択が可能である。FP 計算は、CAMUS の中で FP 計算サブルーチンとなっている PHASE で行なう。TB 計算は GSP モデル(直交基底)、あるいは DoD モデル (非直交基底)、MM 計算は Stillinger-Weber モデル、あるいは Lennard-Jones モデルが選択可能である。
- (2) 領域境界には (001) 面、または (111) 面を選択する。FP および TB 計算領域は、仮想的なリンク原子(分子)を用いて終端する。リンク原子(分子)終端法には以下を用意した。LMM と LAM は本プロジェクトで考案された。
  - ・ SPLAM (Scaled Position Link Atom Method)

- ・LMM (Link Molecular Method)
- ・LAM (Link Atom Method)。

- (3) 各リンク原子 (分子) に働くフォースは、領域境界面、および隣接領域計算手法の組合せに応じて領域境界 Si 原子に分配され、オリジナル系の対応する原子のフォース回復に利用される。特に、FP と TB 計算領域境界では、一方を SPLAM (あるいは LMM) 終端、他方を LAM 終端した上でフォースを分配する。その際の分配法は本プロジェクトにおいて新たに考案された。
- (4) 運動方程式の時間積分アルゴリズムは、Verlet 法と Velocity-Verlet 法の 2 つから選択できる。温度制御 (能勢法)、および圧力制御 (Andersen 法、Parrinello-Rahmann 法) が使用可能である。

本ソフトウェアは文部科学省 IT プログラム「戦略的ソフトウェアの開発」プロジェクトのもとで開発された。本プロジェクト WEB ページ (<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>) より2004年12月に公開を予定している。

#### ◇計算例

FP/TB ハイブリッド法の精度を、速度伝播シミュレーション結果とともに図1に示す。縦の点線は領域境界を示す。時刻  $t=0$  で左端原子に与えられた初速度が、系内部に伝播する様子を調べた。一例として時刻  $t=280$  fsec の結果を示す。FP/TB ハイブリッド法で得た速度分布の結果 (▲) は、全領域 FP 計算の結果 (○) と系全域ではほぼ一致する。全領域 TB 計算の結果 (●) より遙かに良い結果を与える。

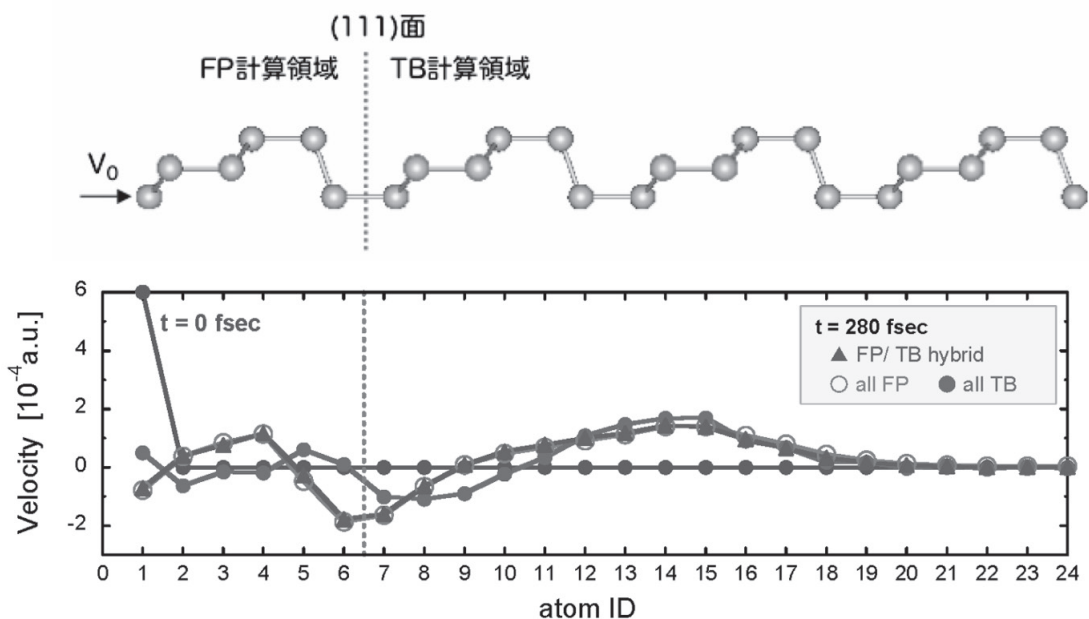


図1 速度伝播シミュレーションの結果。速度の [111] 方向成分の分布。FP/TB ハイブリッド計算 (▲)、全領域 FP 計算 (○)、全領域 TB 計算 (●)。縦の点線は FP/TB 領域境界。