



分類	ナノシミュレーション
キーワード	タイトバイディングオーダーN法
開発者	高木祥光、宇田毅、大野隆央
作成年月	2004年12月
コード名	FXZTX
使用言語	Fortran90

◇**オーダーN** タイトバイディング計算プログラム (FXZTX) : タイトバイディングモデルを用いて炭素系、シリコン系の全エネルギー、各原子に働く力を計算し、構造最適化並びに分子動力学を行うソフトウェアである。通常、タイトバイディングモデルではエネルギーやその他の物理量を求める場合に要する計算時間は全粒子数  $N$  の3乗に比例して長くなる。そのため、興味のある系に含まれる原子数が数千個になるとシミュレーションを行うことが現実的に不可能であった。そこで、ここでは近年開発されつつあるオーダーN法を採り入れることにより、計算時間の増加量を全粒子数  $N$  に比例させることに成功した。但し、オーダーN法はまだ計算手法自体が研究段階であり、様々な手法が提案されているが、どれも満場一致で迎えられているという程には致っていないというのが現状である。今回採用したオーダーN法はそのうちの1つであり、系にバンドギャップが存在することを前提としないものである。

今回開発されたソフトウェアでは、全エネルギー、力を求める際に厳密対角化、オーダーN法を選択することができ、その求めた力を用いて最安定構造を求めることや分子動力学を行い粒子の振舞を調べることができる。

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

ダイヤモンドの完全結晶の場合の全エネルギーと各原子に働く力を求めるまでの計算時間の全原子数依存性を図1に示す。図には比較のために、厳密対角化による結果も示した。厳密対角化では、計算時間は全粒子数  $N$  が大きくなると急激に増えていき、数千個になると計算時間がとてつもなく長くなるこ

とが予想されるが、オーダーN法では全粒子数Nに比例して計算時間が増していくことがわかる。ここでは、PentiumIV 2.8GHz 1CPUのマシンを用いた。また、図2に2本のカーボン・ナノチューブの上を転がるカーボン・ナノチューブの運動をオーダーN法で解析した際のスナップ・ショットを示す。

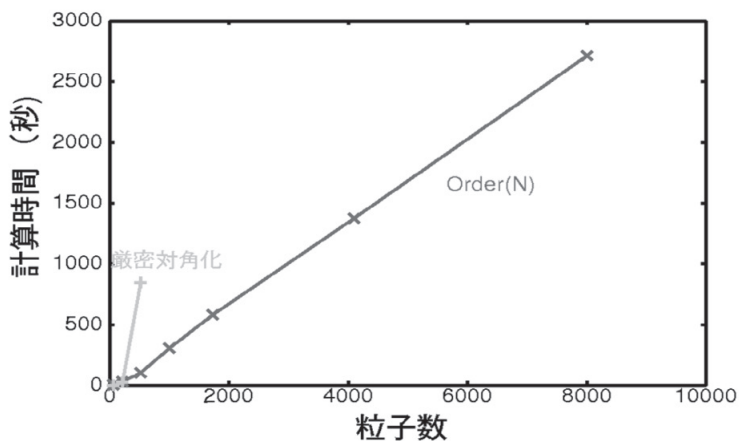


図1 オーダーN法と厳密対角化による計算時間の粒子数N依存

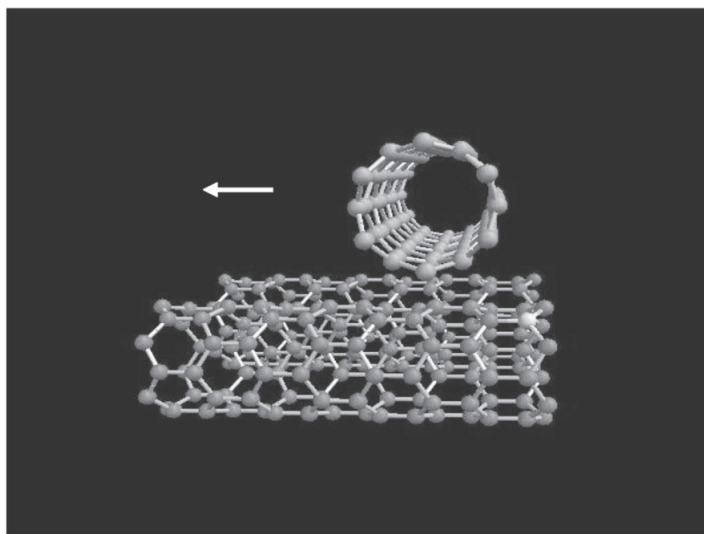


図2 オーダーN法で計算した2本のカーボン・ナノチューブの上を転がるカーボン・ナノチューブのスナップ・ショット