

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発  
 「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」  
 第一原理分子動力学法プログラム PHASE Ver.7  
 -量子論に基づくナノ材料の物性シミュレーション-

Research and Development for Next-generation Information Technology of MEXT,  
 "Revolutionary Simulation Software"

First-principles molecular dynamics program PHASE Ver.7

-Property simulations of nano-materials based on quantum theories-

東京大学生産技術研究所 ————— 計算科学技術連携研究センター

分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理分子動力学法
開発者	山崎隆浩、斎藤峯雄、奈良 純
作成年月	2007年11月
コード名	PHASE Ver.7
使用言語	Fortran90

#### ◇第一原理分子動力学法プログラム PHASE Ver.7

第一原理分子動力学法プログラム PHASE は、様々な材料の特性を量子論に則って計算するプログラムである。擬ポテンシャルを使うことと徹底的な並列化チューニングにより、大規模な系の物性特性シミュレーションを高速に行うことができる。このたび、PHASE に陽電子寿命予測機能と、反応経路探索機能を実装した。これらを実装した新しい PHASE Ver.7 は、ソースプログラム、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。

陽電子消滅法は、材料に入射した陽電子が電子と対消滅する際の陽電子寿命や対消滅により放出される2本の $\gamma$ 線の運動量分布から、材料の構造特性を探る手法である。特に材料中の欠陥特性を知るのに適している。PHASE を使って完全結晶における陽電子寿命計算を行い、計算結果を実験結果と照らし合わせることによって、材料の品質を評価する事が可能になる。

また、反応経路探索機能は、与えられた反応前後の構造から複数の初期中間構造（レプリカ）をつくり、レプリカ同士が重なり合わないで適当な距離を保つように仮想的なバネでつないで一斉に構造最適化することで、反応経路を自動的に求める手法である。

#### ◇プログラムの概要

- (1) 陽電子寿命：さまざまな系に対する陽電子寿命の計算が可能である。まず、系の電子状態を自己無撞着に解いてこれを固定し、後処理において陽電子状態を固有エネルギーが収束するまで逐次近似法により求める。そうして得た陽電子分布と電子分布を用い、2成分密度汎関数法に基づく局所密度近似により陽電子寿命を計算する。誘電体の場合、電子誘電率を用い、局所密度近似を補正できる。
- (2) 反応経路探索：反応の始状態と終状態の構造を読み込み、それらの間に5~10個程度の初期中

間構造（レプリカ）を幾何学的に生成する。隣接するレプリカをバネでつなぎ、両端（始・終構造）は固定したまま、全体構造を最適化する。全体が収束したとき、各レプリカを辿ればそれが反応経路になっており、各レプリカの全エネルギーをプロットすれば、反応活性化エネルギーが分かる。レプリカをつなぐバネのバネ定数は入力ファイルからも与えることができる。

◇計算例

- (1) 陽電子寿命：さまざまな材料の陽電子寿命計算結果を図1のグラフに示す。グラフの横軸は陽電子寿命時間の実験値であり、縦軸がその計算値である。計算値の実験値からのずれは大きくても10%、多くは5%以内であり、十分な精度を持っていることが分かる。

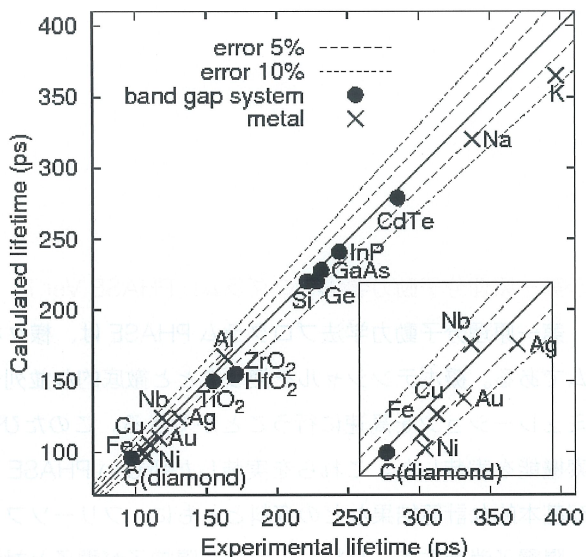


図1 陽電子寿命の計算値と実験値の相関。交換相関相互作用は局所密度近似（LDA）で与えており、バンドギャップのある系に対しては、電子誘電率を与えて寿命予測の補正を行っている。

- (2) 反応経路探索：図2はSi(111)面上のF原子(矢印)の拡散について計算した例である。経路上の中間レプリカ数は8である。拡散経路及び活性化エネルギーがこの計算から得られる。

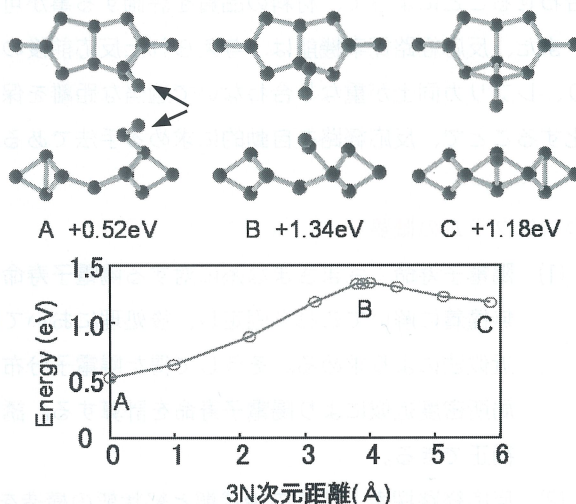


図2 Si(111)面上のF原子の拡散経路。上二段は、上から見た構造と断面構造図である。両端（AとC）と遷移状態（B）の構造のみ表示している。下のグラフは、始・終状態とその間の全エネルギーである。