

分子動力学計算プログラム NEW-RYUDO の開発

○三浦 隆治¹、遠藤 明¹、久保 百司¹、宮本 明^{1,2}¹東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)²東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 04)

【緒言】

近年、分子シミュレーション（計算化学）は様々な分野に応用され、新規材料の研究開発ツールとして、徐々に成果を挙げつつある。しかしながら、実験結果と直接比較できるような、より実践的な計算結果を得るためには、電場存在下などの特殊条件を考慮したシミュレーションが必要になってくる。そこで本研究では、様々な特殊条件の導入をより容易にするため、ANSI 準拠の C 言語を用いて、新しい分子動力学(MD)計算プログラム「NEW-RYUDO」を開発し、熱伝導や電場、せん断場、分子線照射、結晶成長過程などのシミュレーション機能を実現した。

【方法】

NEW-RYUDO プログラムの開発には、IBM-PC 互換機に Linux を導入した環境を用いた。コンパイラには gcc を用いた。動作確認は SGI 製(IRIX)や HP 製(HP-UX)、SUN 製(Solaris)などの UNIX ワークステーションのほか、VisualC++によるコンパイルで MS-Windows 上での動作も確認した。

MD 計算の基本機能としては、運動方程式の解法に Verlet 法、定温制御に速度スケールリング、定圧制御にセル軸長スケールリングを、それぞれ採用した。また、古典 MD 法に基づく原子間ポテンシャルとして、BMH、Morse、LJ、SW、長距離振動、および CVFF 型ポテンシャルを採用した。

【結果と考察】

NEW-RYUDO によって以下の計算機能を実現した。

・熱伝導計算

系内の2箇所を、それぞれ高温部、低温部とし、任意の温度一定に制御することで、熱伝導過程を計算できるようにした。このとき、高温部と低温部の指定は、原子または元素ごとに指定するほか、任意の座標範囲でも指定できるようにすることで、結晶などの固体だけでなく、液体や気体でも計算できるようにした。また、この機能を用いて、実際に金属や酸化物、無機流体について熱伝導計算を行い、その熱伝導率の傾向が実験値と同じになることを確認した。ここで図1に、Pt結晶での熱伝導計算の様子を、各原子の運動エネルギー分布で表したものを示す。

・外力および電場計算

任意の原子または元素に、計算中一定の外力を掛け続けることで、特定の部位に圧力を加えるなどの計算を可能にした。また、古典 MD では原子の電荷が一定であることから、上述の外力を電場から受ける力とすることで、電場存在下のシミュレーションも可能になった。

・せん断場計算

潤滑油などの摩擦過程を計算する場合、水平方向に移動する固体間に挟まれた分子を検討することが、実験研究と比較する上でよりのぞましいと考えられる。そこで任意の原子または元素を、計算中常に一定の速度で移動させ続ける機能を設け、せん断場を想定した計算を実現した。

・結晶成長（分子線照射）過程

MBE などの結晶成長過程や分子線照射過程などを検討するため、表面構造の上空に任意の原子を任意の間隔と速度で発生させ、またこれを一定時間後に削除する機能を実現した。

【結論】

NEW-RYUDO の開発によって、熱伝導や電場など、特殊条件下の MD 計算が可能になったほか、今後求められる様々な応用計算をより容易に実現することができるようになった。 図1. Ptの熱伝導計算過程

