

分子動力学法と量子化学計算のハイブリッド シミュレーションのための視覚化解析手法の開発

○三浦隆治¹、古山通久¹、久保百司^{1,2}、宮本 明^{1,3}

¹ 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)

² 科学技術振興機構さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

³ 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 10)

【緒言】

近年、異なる複数の計算手法を融合させたハイブリッドシミュレーションが開発され、なかでも分子動力学法に量子化学計算を組み合わせる方法では、大規模な系で電子状態や化学反応を考慮した計算が可能になるため、注目を集めている。しかしながら、このような計算では、境界部分の設定や、複数の計算手法が混在した計算結果の解析などの問題があり、従来のソフトウェアだけでは取り扱いが困難であった。

そこで本研究では、ハイブリッド計算を対象とした新しい視覚化解析プログラムを開発することで、ハイブリッドシミュレーションのより効果的な活用を実現した。

【方法】

本研究では、これまで当研究室で開発してきた視覚化解析プログラム **NEW-RYUGA** をベースに、ハイブリッド計算に対応するための機能拡張を行った。開発環境としては、**NEW-RYUGA** の動作環境である **Linux** と **X-Window** をインストールした **IBM-PC** 互換機を用いた。

【結果と考察】

半導体製造プロセスにおいては、エッチングプロセスや **Chemical Mechanical Polishing (CMP)**、イオン注入プロセスなど、大規模な表面系での化学反応や電子状態を考慮したシミュレーションが必要とされている。ここでは、大規模な **Si** 表面モデルに、各種原子を照射する計算を例にして、各種視覚化解析機能を説明する。

まず、ハイブリッド計算の境界設定では、力の連続性を維持することが特に重要である。そこで各原子にかかる力をリアルタイムに矢印で視覚化することで、力の詳細な変化を直感的に把握することができるようにした(図1)。

また、各原子の運動エネルギー分布を色分けして視覚化することで、融合部分などをより効果的に検討することを可能にしたほか(図2)、量子化学計算結果から分子軌道や電荷分布の視覚化解析を実現した(図3)。

このほか、全体のアニメーション表示やステレオグラム表示なども実現し、ハイブリッド計算をより効果的に解析することが可能になった。

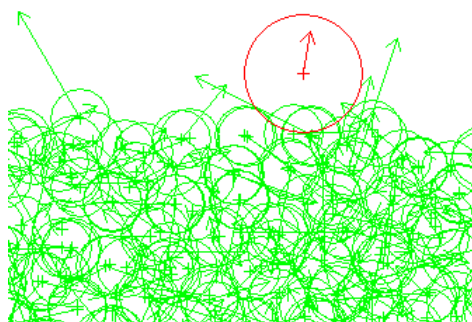


図1 ハイブリッドシミュレーションにおける各原子の力の矢印表示

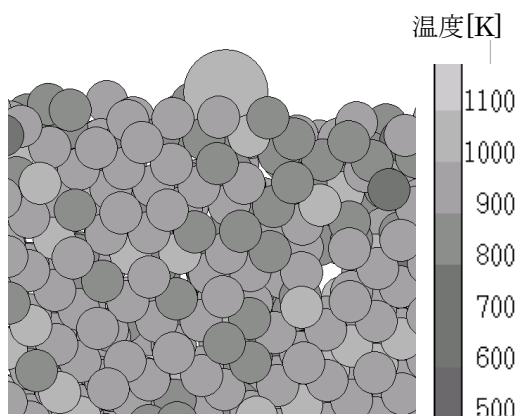


図2 ハイブリッドシミュレーションにおける運動エネルギー(温度)分布表示

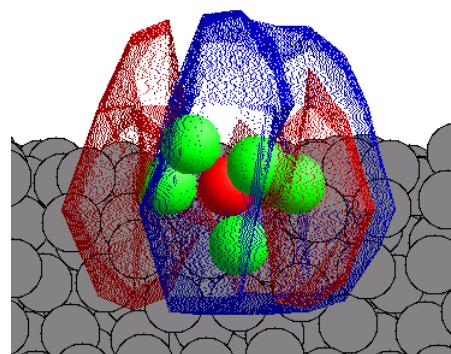


図3 ハイブリッドシミュレーションにおける量子化学計算部分の分子軌道表示