

分子シミュレーションによるナノスケール材料科学

当社開発分子動力学コードの応用

背景

固体物理における計算機シミュレーションは、電子状態計算にその基礎を置くものである。いわゆる、第一原理的手法、すなわちシュレーディンガー方程式を数値的に扱う手法は、極めて信頼性の高いものとなりつつあるが、しかし、コストも高くつく。そのため、巨大な系を扱う場合には、強結合法という半経験的手法が用いられることもある。強結合法では、ハミルトニアン of 行列要素を、シュレーディンガー方程式の数値的解法によって評価するのではなく、シンプルな原子間距離の関数に置き換えて計算する。パラメーターを適切に設定することで、凝集エネルギーやバンド構造などの現実の物質の性質を精確に再現することが可能である。第一原理・半経験的手法のいずれかの電子状態計算によって、凝集エネルギー(=原子間ポテンシャルエネルギー)とともに、各原子に加わる力が評価されるので、分子動力学の手法を用い、運動方程式を積分すれば、結晶系のダイナミクスを追跡できることになる。

このコードでは、高速な半経験的電子状態計算と、高精度な第一原理電子状態計算の双方を実装した。分子動力学法のスキームを用いて、任意の圧力・温度において、結晶の動的構造転移のシミュレーションや反応経路の探索を効率的に行うことを可能にしている。電子状態計算に関して、オーダーN法というテクニックを用いることで、計算の高速化(系のサイズに線形に比例する程度ですむ)を実現している。このコードに対しては、MPIなどの手法による並列計算の実装も可能である。