九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

計算材料設計システムMASPHYCによる解析事例

宮崎, 則幸
九州大学工学部化学機械工学科

竹内, 宗孝
富士通株式会社計算科学研究センター第一研究部

https://doi.org/10.15017/1470286

出版情報：九州大学大型計算機センター広報. 29 (2), pp.88-92, 1996-06. 九州大学大型計算機センター
バージョン：
権利関係：

KYUSHU UNIVERSITY

解　　　説

計算材料設計システムMASPHYCによる解析事例

宮崎則幸*、竹内宗孝**

1. MASPHYCとは

MASPHYC(Material Design System by means of Computational Physics and Chemistry)は富士通(株)が開発した計算材料設計システムであり、独自の分子動力学ソフトウェアが組込まれおり、九州大学大型計算機センターで利用可能である[1]。

図1に分子動力学法の入力情報と出力情報を示す。入力情報として、原子間または分子間に働く相互作用力を表すポテンシャル関数と温度や圧力といった物理的環境を入力し、その条件下での多体系のニュートンの運動方程式を解き、その結果得られる各時刻での原子の位置座標を統計処理すると、熱力学性質(内部エネルギー、比熱、弾性定数など)が得られる。また、各時刻の原子の位置と速度を統計処理すると動的性質(拡散係数、粘性係数、熱伝導度など)や分光的性質が得られる。

MASPHYCは原子・分子集合体の固体・液体を解析対象としており、有機化合物はもちろんのこと、セラミックス、半導体、金属まで幅広い材料に適用することが可能である。MASPHYCは、図2に示すように、プリ・ポスト処理を行うMASPHYC/WB(Work Bench)と分子動力学シミュレータMASPHYC/MD (Molecular Dynamics simulator)から構成されている。MASPHYC/WBは、下記の5つのサブシステムから構成されている。

(1) DB管理システム

分子に関する情報を入力、表示する「分子情報データベース」、結晶構造を登録管理する「結晶情報データベース」、原子・分子間ポテンシャルをポテンシャルライブラリとして登録する「ポテンシャルデータベース」から構成されている。

(2) MD入出力ファイル作成システム

分子動力学シミュレーションに必要となる様々な条件を設定するシステムである。MD基本セルのモデリング、温度、圧力条件などをマウス操作で簡単に設定できる。

(3) MD管理システム

分子動力学シミュレータMASPHYC/MDとのデータ転送、ジョブの起動などの連携を行う。

(4) 結果解析システム

拡散係数などの輸送係数、さらに動径分布関数、X線干渉関数、ボロノイ多面体の形状、数などの解析を行う。

(5) 表示機能

エネルギー、体積、基本セル定数、温度、圧力などの熱力学的性質、および拡散係数などの結果解析システムの出力結果を二次元グラフィックスや三次元グラフィックスで表示する。

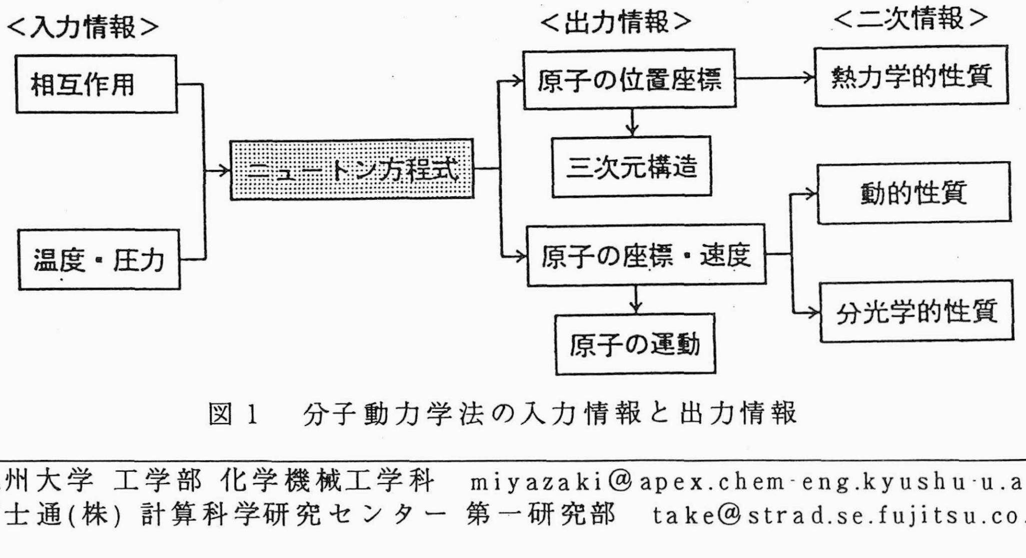

図1　分子動力学法の入力情報と出力情報

*　九州大学 工学部 化学機械工学科　miyazaki@apex.chem-eng.kyushu-u.ac.jp
**　富士通(株) 計算科学研究センター 第一研究部　take@strad.se.fujitsu.co.jp

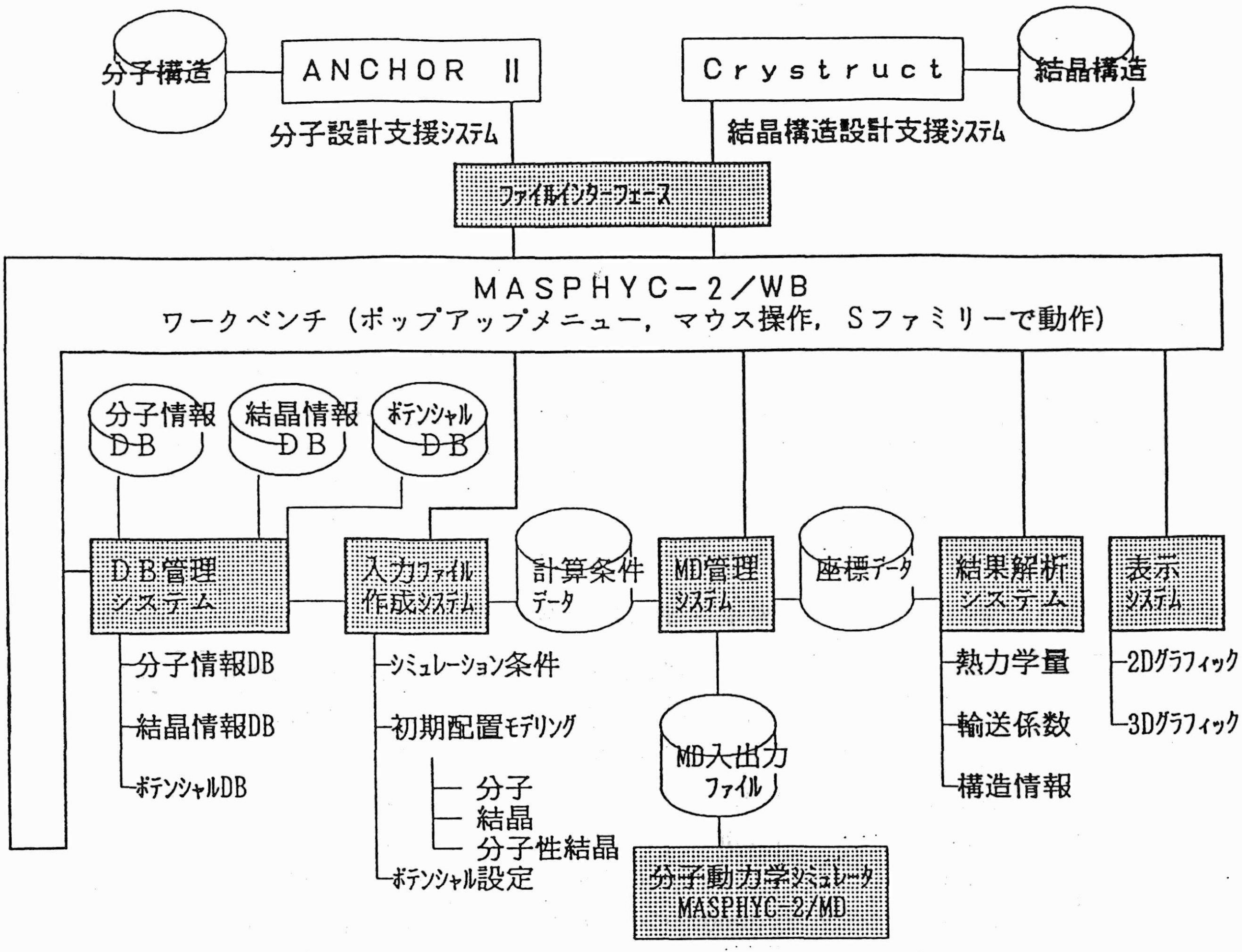

図2　MASPHYCのシステム構成図

また、分子動力学シミュレータMASPHYC/MDの機能を以下に示す。

(1) アンサンブル

MASPHYCではNEV、NTV、NHP、NTPアンサンブルをサポートしている。これらのアンサンブルを用いて、孤立したマイクロクラスターのシミュレーション(NEVアンサンブルを用いる)や固体の構造相転移やガラス転移、結晶化過程、融解過程などのシミュレーション(NTPアンサンブルを用いる)ができる。

(2) 動力学

MASPHYCでは質点力学と拘束力学をサポートしている。質点力学では、原子を質点として扱い、原子間に働く相互作用力として座標の連続関数を用いる。この力学の対象は多く、セラミックス、金属、半導体などの無機化合物および高分子、生体高分子などの有機化合物などあらゆる材料が扱える。一方、拘束力学は、原子系の自由度の一部を凍結し、それによって生じる拘束条件を持った質点力学を解くことにより運動を求める方法である。有機分子の集合体では、結合長、結合角の振動は、集合体の構造にあまり影響を与えないので、それらの自由度を凍結して計算する拘束力学がよく用いられている。

(3) 境界条件

MASPHYCでは、クラスターとバルクの境界条件のみをサポートしている。今後、表面・界面、MBE(分子線エピタキシャル)のための境界条件もサポートの予定である。

(4) 数値積分法

運動方程式の数値積分法としては、MASPHYCでは現在の所Gear法をサポートして

いる。

MASPHYCのシミュレータは大型計算機センターのベクトルユニットを用いることによって非常に高速な計算を行うことが可能になっている。また、表示システムはウインドウシステムを利用した扱いやすいものとなっている。

本報では、MASPHYCによる解析事例として経験的二体間ポテンシャルの一つであるJohnsonポテンシャル[2]を用いたFe単結晶のbcc構造(α-Fe)からfcc構造(γ-Fe)への相転移の分子動力学シミュレーション結果を示す。

2. シミュレーション結果

α-Feからγ-Feへの相転移シミュレーションをJohnsonポテンシャルを用いたNTPアンサンブル 分子動力学により行った。

解析は初期状態の設定温度を300Kとし、2500Kまで上昇させて行った。解析に使用した時間間隔(Δt)は1fsとし、昇温を表1に示すように、Case 1～7の7通りについて行った。図3に、Case1の場合の設定温度T_{set}の変化を示す。また、現在のMASPHYCのシミュレータはVP2600のジョブクラスvlで実行されるので、CPUタイムの制限値は180分である。この計算時間内で計算できるには、Johnsonポテンシャルを用いた粒子数250個

表1　相転移の解析条件

case	昇温時間 [ps]([step])	総計算時間 [ps]([step])	昇温速度 [K/ps]([K/step])
1	1　(1000)	100　(100000)	22　(0.022)
2	2　(2000)	200　(200000)	11　(0.011)
3	4　(4000)	400　(400000)	0.55　(0.0055)
4	5　(5000)	500　(500000)	0.44　(0.0044)
5	10　(10000)	1000　(1000000)	2.2　(0.0022)
6	20　(20000)	2000　(2000000)	1.1　(0.0011)
7	40　(40000)	4000　(4000000)	0.55　(0.00055)

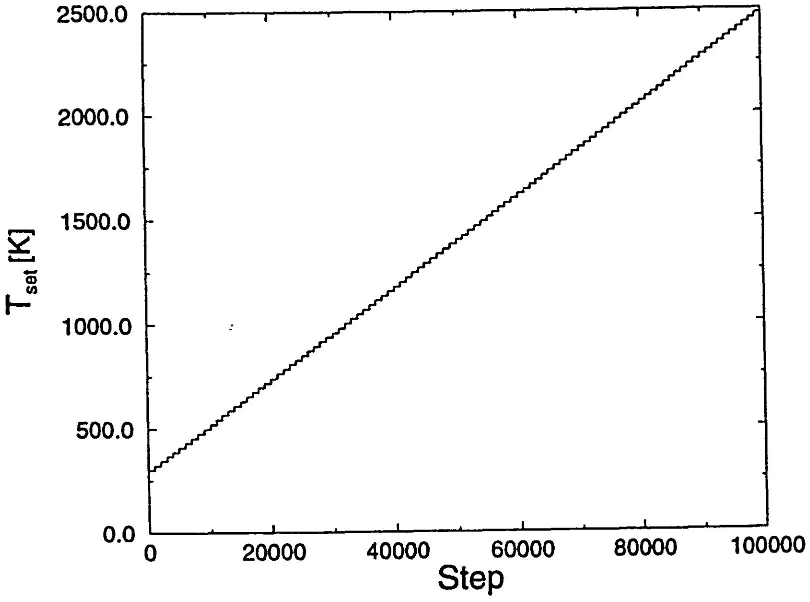

図3　設定温度の変化

の系で100万ステップ程度までである。そこで、Case6,7の場合はリスタートを行うことにより実行した。

Case 1の場合の温度T、体積Vおよび圧力Pの変化を図4に、基本セルのx,y,z方向の長さ(それぞれをa,b,cとする)の変化を図5にそれぞれ示す。これらの図より1600K(60000step)付近で体積の変動が見られ、基本セルの長さが大きく変化していることがわかる。また、ボロノイ体積による解析によって、bccからfccへと結晶構造が変化していることが確認できた。したがって、1600K付近で相転移が生じていると考えることができる。また、2500K(90000step)付近で急激な温度の減少および体積の増加が生じているが、これはFeの溶融に対応していると考えられる。

前記のCase1～7の全てについてbccからfccへの相転移温度T_tと融点温度T_mを求め、総計算ステップに対してプロットしたものを図6に示す。図中に示した実線はT_tとT_mの実験値であり、それぞれ1179K、1811Kである。実験データは昇温速度が非常に小さい場合(すなわち計算ステップ数が非常に大きい場合)に対応していると考えられる。図6より、融点については昇温速度が減少していくに従って実験値の方に近づいていく傾向が認められる。一方、相転移温度については100万ステップまでは同様な傾向が認められるが、その後は逆の傾向となる。相変化が生じるためには系に何らかの外乱が加わる必要がある。このような計算の場合は、その外乱は温度の揺らぎであろう。しかし、昇温速度を減少させると系の安定性が良くなり、外乱が小さくなることにより、相転移が起こりにくくなると考えられる。

次に、相転移後の格子定数を調べた。格子定数は二体相関関数を用いて推算した。二

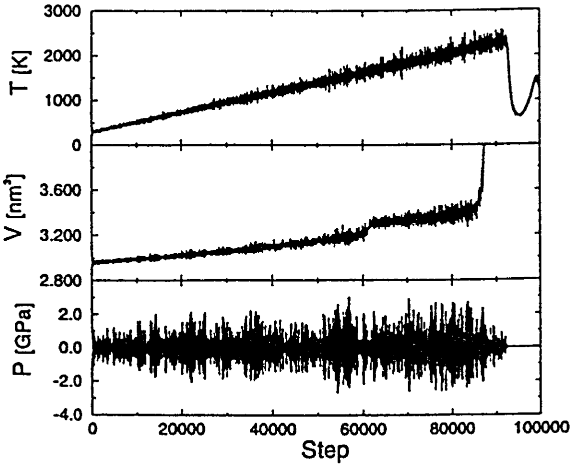

図4　状態量T, V, Pの変化

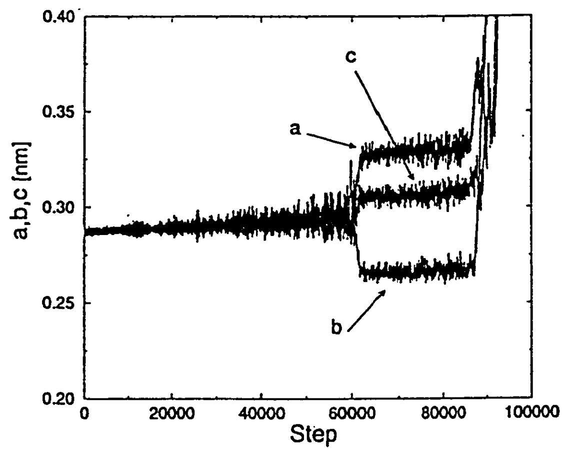

図5 基本セルの長さの変化

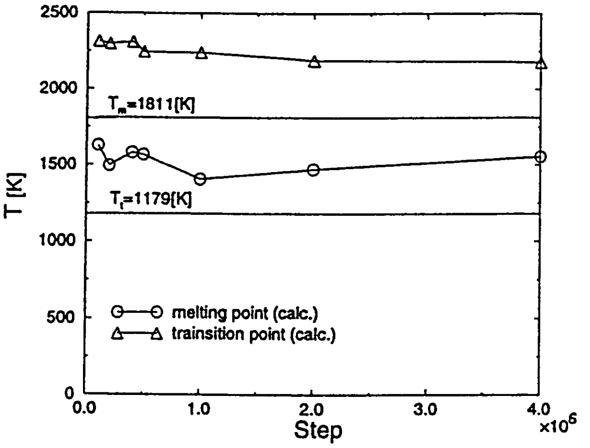

図6　相転移温度、融点温度の昇温速度による変化

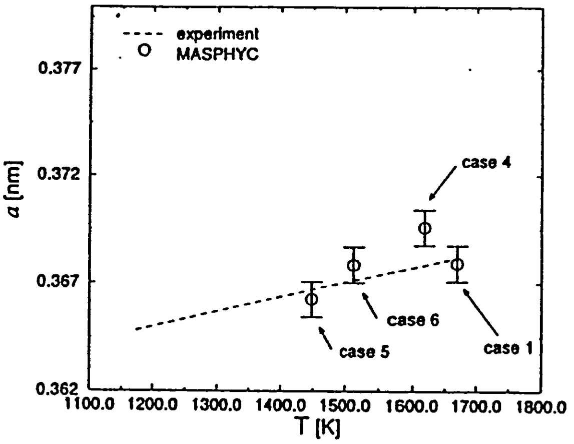

図7　相転移後の格子定数

体相関関数の第一ピークが生じる距離から原子間の最短距離を求めることができる。γ-Feはfcc結晶であるため、この値を2倍することにより格子定数とすることができる。このようにして求めた格子定数の値をCase1,4,5,6の場合について図7に示す。実験値と比較してかなり良く一致していることがわかる。

3. おわりに

九州大学大型計算機センターにインストールされている分子動力学法計算材料設計システムMASPHYCによる解析事例として、Fe単結晶の相転移現象のシミュレーション結果を示した。Johnsonポテンシャルといった簡単な経験ポテンシャルによって相転移現象をある程度とらえることができた。なお、分子動力学を用いることにより、線膨張係数あるいは弾性係数といった固体の物性値を推算することもできる[3]。

MASPHYCに関する資料[4]は大型計算機センターに備えられている。

参考文献

(1) 境　理恵子, 他3名,「新システムの紹介～何が出来る？！～」, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.29, No.1(1996), pp.15-34.

(2) R. A. Johnson, "Interstitials and Vacancies in α Iron", Physical Review, Vol.134, No.5A(1964), pp. A1329-A1336

(3) 宮崎則幸, 塩崎靖範,「分子動力学法による固体の物性値の推算」, 日本機械学会論文集(A編), Vol.62, No.594(1996), pp.430-436.

(4)「MASPHYC/WB使用手引書(計算材料設計システム/ワークベンチ)」, 富士通(株).