

大規模シミュレーションによる材料設計と 3 次元可視化

佐原亮二、佐藤和弘、五十嵐伸昭、Rodion Belosludov、水関博志、川添良幸

東北大学金属材料研究所

sahara@imr.edu

目的 我々の研究グループでは、多様化・複雑化する一方の材料設計の本質的改善を図るべく、物性理論に基づく第一原理計算及びモデルシミュレーション手法開発と応用を中心に研究を行っている。現在、独自の理論的枠組みの構築と共に、東北大学金属材料研究所に平成 18 年 3 月に更新されサービスが開始された HITACHI SR11000 を中心とした材料設計開発専用のスーパーコンピューティングシステムを駆使して、他では類を見ない大規模シミュレーション計算を行い、ナノスケール材料の電子状態、第一原理予測による合金相図、磁性体薄膜の相転移現象、モンテカルロ法によるダイヤモンドやポリマーの成長過程等、様々な対象を物理的・化学的・材料学的に解明するための研究を行っている。

より複雑化する出力結果を分かりやすく可視化しながら効率よく解析やディスカッション、プレゼンテーションをすることが必要となっており、それに特化したプレゼンテーションシステムの導入と構築も行っている。

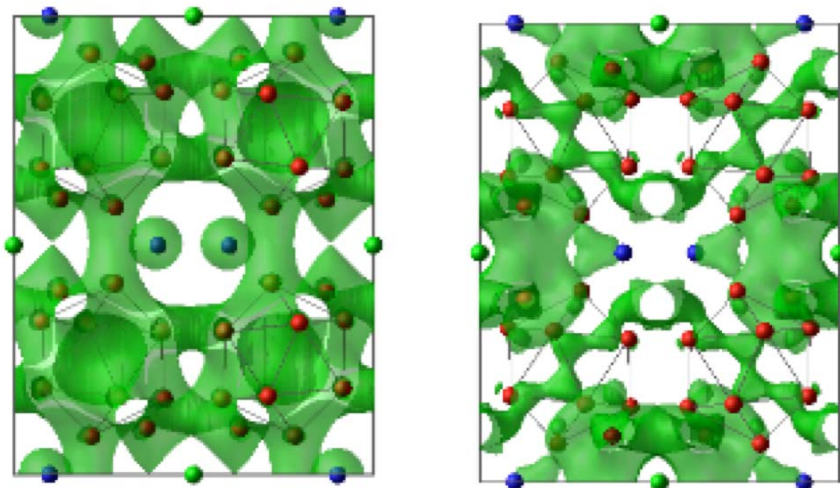
方法 第一原理計算により得られた材料特性について、3 次元可視化を行った。可視化には AVS/Express を用いた。なお今回のプレゼンテーションでは、電気ケーブルの機能を有するナノデバイスとして期待されるシクロデキストリン被覆ポリアニリン⁽¹⁾、エネルギー関連物質として注目されているメタンハイドレート⁽²⁾、高硬度特性を有するホウ化物⁽³⁾として期待される金属を含むボロンリッチ化合物、という 3 つの材料を例に取り、それらの電子状態解析や振動解析に対する可視化の結果を示す。

結果 例として次ページの図には、高硬度特性を示すボロンリッチ化合物 AlLiB_{14} の電子状態の可視化の例を示す。(a)等電荷密度分布、(b) AlLiB_{14} と AlLi およびホウ素間の電荷密度分布の差分。赤で示したホウ素が共有結合で結ばれ、さらに、青と緑で示した金属添加により電子がホウ素へ移動し、ホウ素間の結合へ正に寄与するという結合の強化機構が分かる。本化合物は結晶の中に B_{12} という二十面体クラスターを有する複雑な結晶構造であるため、3 次元可視化による電子状態解析が非常に重要な役割を果たした。当日は、これらの可視化に対する手続きを簡略化した AVS モジュールの作製についても述べる。

謝辞 本研究を遂行するにあたり、東北大学金属材料研究所スーパーコンピューティングシステム HITACHI SR11000 を利用させていただきました。計算材料学センターの皆様のご協力に深く感謝いたします。

参考文献

- (1) R. V. Belosludov, A. A. Farajian, Y. Baba, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, *Comp. Mater. Sci.* 36 (2006) 130.
- (2) R. V. Belosludov, V. R. Belosludov, J. Kudoh and Y. Kawazoe, *The 5th International Conference on Gas Hydrates*, 13-16 June, 2005, Trondheim, Norway.
- (3) R. Sahara, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, V. Kumar, K. Nakajima, and Y. Kawazoe, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 184102.



(a)

(b)

図 高硬度特性を示すボロンリッチ化合物 AlLiB_{14} の電子状態の可視化の例。(a) 等電荷密度分布、(b) AlLiB_{14} と AlLi およびホウ素間の電荷密度分布の差分。赤で示したホウ素が共有結合で結ばれ、さらに、青と緑で示した金属添加により電子がホウ素へ移動し、ホウ素間の結合へ正に寄与するという結合の強化機構が分かる。