

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2010-15284

(P2010-15284A)

(43) 公開日 平成22年1月21日(2010.1.21)

(51) Int.Cl.

G06F 19/00 (2006.01)

F I

G06F 19/00 I I O

テーマコード (参考)

審査請求 未請求 請求項の数 8 O L (全 15 頁)

|           |                              |          |                     |
|-----------|------------------------------|----------|---------------------|
| (21) 出願番号 | 特願2008-173118 (P2008-173118) | (71) 出願人 | 000002107           |
| (22) 出願日  | 平成20年7月2日 (2008.7.2)         |          | 住友重機械工業株式会社         |
|           |                              |          | 東京都品川区大崎二丁目1番1号     |
|           |                              | (74) 代理人 | 100091340           |
|           |                              |          | 弁理士 高橋 敬四郎          |
|           |                              | (74) 代理人 | 100105887           |
|           |                              |          | 弁理士 来山 幹雄           |
|           |                              | (74) 代理人 | 100141302           |
|           |                              |          | 弁理士 鶴飼 伸一           |
|           |                              | (72) 発明者 | 広瀬 良太               |
|           |                              |          | 神奈川県横須賀市夏島町19番地 住友重 |
|           |                              |          | 機械工業株式会社横須賀製造所内     |
|           |                              | (72) 発明者 | 大西 良孝               |
|           |                              |          | 神奈川県横須賀市夏島町19番地 住友重 |
|           |                              |          | 機械工業株式会社横須賀製造所内     |

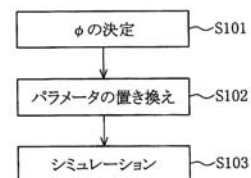
(54) 【発明の名称】 シミュレーション方法及びプログラム

(57) 【要約】

【課題】 高精度なシミュレーションを実現する。

【解決手段】 (a) シミュレーション対象の材料を構成する粒子の二体間ポテンシャル $\phi$ を、ポテンシャルが最小となる距離に対応するパラメータ $r_0$ 、ポテンシャルの形状を規定する少なくとも1つのパラメータ $C_0$ を用い、2つの粒子の中心間距離 $r$ の関数 $\phi(r, r_0, C_0)$ として決定する。(b) パラメータ $r_0$ を、 $r_0$ とは異なる $r_1$ に置き換えたとき、シミュレーション対象の材料のヤング率の変化が抑制されるように、パラメータ $C_0$ を $C_1$ に置き換える。(c) 新たなパラメータ $r_1$ と $C_1$ とで定義される二体間ポテンシャル $\phi(r, r_1, C_1)$ を用いてシミュレーションを行う。

【選択図】 図8



## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

(a) シミュレーション対象の材料を構成する粒子の二体間ポテンシャル $\phi$ を、ポテンシャルが最小となる距離に対応するパラメータ $r_0$ 、ポテンシャルの形状を規定する少なくとも1つのパラメータ $C_0$ を用い、2つの粒子の中心間距離 $r$ の関数 $\phi(r, r_0, C_0)$ として決定する工程と、

(b) パラメータ $r_0$ を、 $r_0$ とは異なる $r_1$ に置き換えたとき、シミュレーション対象の材料のヤング率の変化が抑制されるように、パラメータ $C_0$ を $C_1$ に置き換える工程と、

(c) 新たなパラメータ $r_1$ と $C_1$ とで定義される二体間ポテンシャル $\phi(r, r_1, C_1)$ を用いてシミュレーションを行う工程と  
を有するシミュレーション方法。

10

## 【請求項 2】

前記工程(b)において、二体間ポテンシャル $\phi$ を与える基点となる粒子から、1番め、2番め、及び3番めに近い粒子のポテンシャル値が、それぞれ置き換え前後で同一となるように、パラメータ $C_0$ を $C_1$ に置き換える請求項1に記載のシミュレーション方法。

## 【請求項 3】

前記工程(a)において、二体間ポテンシャルを、

20

$$\phi(r) = D(e^{-2A(r-r_0)} - 2 \times e^{-A(r-r_0)})$$

として決定する請求項1または2に記載のシミュレーション方法。

## 【請求項 4】

前記工程(b)において、 $x$ を定めて、 $r_0$ を $x r_0$ 、 $A$ を $A/x$ 、 $D$ を $x^3 D$ に置き換える請求項3に記載のシミュレーション方法。

## 【請求項 5】

30

種々のシミュレーションを行うためにコンピュータを、

シミュレーション対象の材料を構成する粒子の二体間ポテンシャル $\phi(r, r_0, C_0)$ が最小となる距離に対応するパラメータ $r_0$ を、 $r_0$ とは異なる $r_1$ に置き換えるための情報を入力する手段、

前記 $r_0$ を $r_1$ に置き換えたとき、前記シミュレーション対象の材料のヤング率の変化が抑制されるように、前記二体間ポテンシャルの形状を規定するパラメータ $C_0$ を置き換えるべき $C_1$ を得る手段、

新たなパラメータ $r_1$ と $C_1$ とで定義される二体間ポテンシャル $\phi(r, r_1, C_1)$ を用いてシミュレーションを行う手段  
として機能させるためのプログラム。

40

## 【請求項 6】

前記 $C_1$ を得る手段は、

前記二体間ポテンシャル $\phi$ を与える基点となる粒子から、1番め、2番め、及び3番めに近い粒子のポテンシャル値が、それぞれ置き換え前後で同一となるパラメータ $C_1$ を得る請求項5に記載のプログラム。

## 【請求項 7】

前記二体間ポテンシャルが、

50

$$\phi(r) = D(e^{-2A(r-r_0)} - 2 \times e^{-A(r-r_0)})$$

で表現される請求項 5 または 6 に記載のプログラム。

【請求項 8】

前記  $C_1$  を得る手段は、 $r_0$  が  $x r_0$  となるように置き換えられたとき、 $A$  を  $A/x$ 、 $D$  を  $x^3 D$  に置き換えて、新たなパラメータ  $A_1$  と  $D_1$  とを得る請求項 7 に記載のプログラム。

【発明の詳細な説明】

10

【技術分野】

【0001】

本発明は、シミュレーション方法及びプログラムに関し、特に、分子動力学を用いたシミュレーション方法、及びそれをコンピュータに実行させるためのプログラムに関する。

【背景技術】

【0002】

コンピュータを用いて物質科学全般の現象を探索する方法として、分子動力学法に基づく分子シミュレーションが知られている。分子シミュレーションによって、分子のポテンシャルエネルギーや最安定構造等物質の特性を、分子レベルで解明することが可能である。

【0003】

20

分子動力学法に基づく分子シミュレーションに関して、種々の研究がなされている。たとえば少ない計算量で分子動力学計算を実行するシミュレーション方法の発明が開示されている（たとえば、特許文献 1 参照）。

【0004】

しかしながらこれまでのところ、分子動力学シミュレーションを行う際のポテンシャルパラメータとヤング率との関係は明確にされておらず、たとえばヤング率を一定としたまま、ポテンシャルパラメータを変更してシミュレーションを行うことは困難であった。

【0005】

【特許文献 1】特開 2006 - 285866 号公報

【発明の開示】

30

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

本発明の目的は、高精度なシミュレーションを実現するシミュレーション方法を提供することである。

【0007】

また、高精度なシミュレーションを実現するシミュレーション方法を実行させるプログラムを提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0008】

本発明の一観点によれば、(a) シミュレーション対象の材料を構成する粒子の二体間ポテンシャル  $\phi$  を、ポテンシャルが最小となる距離に対応するパラメータ  $r_0$ 、ポテンシャルの形状を規定する少なくとも 1 つのパラメータ  $C_0$  を用い、2 つの粒子の中心間距離  $r$  の関数  $\phi(r, r_0, C_0)$  として決定する工程と、(b) パラメータ  $r_0$  を、 $r_0$  とは異なる  $r_1$  に置き換えたとき、シミュレーション対象の材料のヤング率の変化が抑制されるように、パラメータ  $C_0$  を  $C_1$  に置き換える工程と、(c) 新たなパラメータ  $r_1$  と  $C_1$  とで定義される二体間ポテンシャル  $\phi(r, r_1, C_1)$  を用いてシミュレーションを行う工程とを有するシミュレーション方法が提供される。

40

【0009】

また、本発明の他の観点によると、種々のシミュレーションを行うためにコンピュータを、シミュレーション対象の材料を構成する粒子の二体間ポテンシャル  $\phi(r, r_0, C$

50

。 ) が最小となる距離に対応するパラメータ  $r_0$  を、  $r_0$  とは異なる  $r_1$  に置き換えるための情報を入力する手段、前記  $r_0$  を  $r_1$  に置き換えたとき、前記シミュレーション対象の材料のヤング率の変化が抑制されるように、前記二体間ポテンシャルの形状を規定するパラメータ  $C_0$  を置き換えるべき  $C_1$  を得る手段、新たなパラメータ  $r_1$  と  $C_1$  とで定義される二体間ポテンシャル  $\phi(r, r_1, C_1)$  を用いてシミュレーションを行う手段として機能させるためのプログラムが提供される。

【発明の効果】

【 0 0 1 0 】

本発明によれば、高精度なシミュレーションを実現するシミュレーション方法を提供することができる。

10

【 0 0 1 1 】

また、高精度なシミュレーションを実現するシミュレーション方法を実行させるプログラムを提供することができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【 0 0 1 2 】

二体間ポテンシャルは、たとえば下式 ( 1 ) で表される。

$$\phi = D f \left( \frac{r - r_0}{\alpha} \right)$$

20

【 0 0 1 3 】

・ ・ ( 1 )

二体間ポテンシャルとは、ポテンシャル  $\phi$  が 2 個の原子の中心間の距離  $r$  のみを独立変数として定義される原子間ポテンシャルをいい、式 ( 1 ) において、  $D$ 、  $\alpha$  は、ポテンシャルの形状を規定するパラメータであり、具体的には、それぞれ結合エネルギー、原子の大きさを示すポテンシャルパラメータである。また、  $r_0$  は 2 個の原子が最安定となる原子間距離を示す。右辺の  $f(r)$  という形は左辺の  $\phi$  が  $r$  の関数であることを示す。

30

【 0 0 1 4 】

図 1 は、二体間ポテンシャルを示す概略的なグラフである。グラフの横軸は、2 個の原子間の距離  $r$  を表し、グラフの縦軸はポテンシャル  $\phi$  を表す。最小 ( 極小 ) となるポテンシャル  $\phi$  を与える原子間距離  $r$  が  $r_0$  である。

【 0 0 1 5 】

式 ( 1 ) で表されるポテンシャル  $\phi$  を、ポテンシャルの底 (  $r = r_0$  ) 近傍でテイラー展開することで下の式 ( 2 ) を得る。

40

$$\phi \approx D + \frac{1}{2} \left( \frac{D}{\alpha^2} \right) f''(0) (r - r_0)^2$$

【 0 0 1 6 】

・ ・ ( 2 )

ここで  $f''$  は、関数  $f$  を変数  $r$  で 2 回微分したものである。

【 0 0 1 7 】

式 ( 2 ) の両辺を  $r$  で微分することで、下の式 ( 3 ) が得られる。式 ( 3 ) の左辺の  $F$  は、基点にある原子が距離  $r_0$  近傍に位置する原子に及ぼす力を示す。

50

$$F = \left( \frac{D}{\alpha^2} \right) f''(0)(r - r_0)$$

【 0 0 1 8 】  
 ・ ・ ( 3 )

また、歪  $\varepsilon$ 、応力  $\sigma$  はそれぞれ下式 ( 4 )、( 5 ) で表され、両者の間にはヤング率  $E$  を介して、下式 ( 6 ) の関係がある。なお、式 ( 5 ) において、 $s$  は原子間のクロスセクションを示す。原子間のクロスセクションは、相隣る原子間において、力の働く断面積を意味し、たとえば図 2 に示す面積を表す。

$$\varepsilon = \frac{r - r_0}{r_0}$$

【 0 0 1 9 】  
 ・ ・ ( 4 )

$$\sigma = \frac{F}{s}$$

【 0 0 2 0 】  
 ・ ・ ( 5 )

$$\sigma = E \varepsilon$$

【 0 0 2 1 】  
 ・ ・ ( 6 )

式 ( 4 )、( 5 ) を式 ( 6 ) に代入することにより、下式 ( 7 ) が得られる。

$$F = E \frac{s}{r_0} (r - r_0)$$

【 0 0 2 2 】  
 ・ ・ ( 7 )

そして、式 ( 3 ) と ( 7 ) とから、下式 ( 8 ) を得る。

10

20

30

40

50

$$E = \left( \frac{D}{\alpha^2} \right) f''(0) \frac{r_0}{s}$$

【 0 0 2 3 】

・ ・ ( 8 )

ここで、クロスセクション  $s$  は、 $r_0^2$  のオーダーであるため、

10

$$\frac{r_0}{s} \approx \frac{1}{r_0}$$

【 0 0 2 4 】

・ ・ ( 9 )

と書ける。

【 0 0 2 5 】

20

式 ( 9 ) を式 ( 8 ) に代入することにより、下式 ( 1 0 ) を得る。

$$E \approx \left( \frac{D}{\alpha^2} \right) \frac{1}{r_0} f''(0)$$

【 0 0 2 6 】

・ ・ ( 1 0 )

30

式 ( 1 0 ) は、ヤング率  $E$  とポテンシャルパラメータとの関係を示している。式 ( 1 0 ) によると、ヤング率  $E$  はポテンシャルパラメータ  $D$ 、 $1 / \alpha^2$ 、 $1 / r_0$  に依存 ( 比例 ) する。

【 0 0 2 7 】

ところで式 ( 1 ) は、M o r s e ポテンシャルの場合、

$$\phi(r) = D ( e^{-2A(r-r_0)} - 2 \times e^{-A(r-r_0)} )$$

40

【 0 0 2 8 】

・ ・ ( 1 1 )

と表すことができる。ここで、 $A = 1 / \alpha$  の関係がある。この場合、式 ( 1 0 ) は、

$$E \approx D A^2 \frac{1}{r_0}$$

50

【 0 0 2 9 】  
 ・ ・ ( 1 2 )

と表される。

【 0 0 3 0 】

なお、二体間ポテンシャルは、L e n n a r d - J o n e s ポテンシャルの場合、

$$\phi_{(r)} = D \left( \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right) \quad 10$$

【 0 0 3 1 】  
 ・ ・ ( 1 3 )

と表すことができる。この場合、式 ( 1 0 ) に相当する式は、

$$E \approx \left( \frac{D}{r_0^2} \right) \frac{1}{r_0} = \left( \frac{D}{r_0^3} \right) \quad 20$$

【 0 0 3 2 】  
 ・ ・ ( 1 4 )

と表される。

【 0 0 3 3 】

本願発明者らは、ヤング率 E とポテンシャルパラメータとの関係 ( ( 式 1 0 ) で示される関係 ) を確認するために、銅 ( C u ) の M o r s e ポテンシャルの場合 ( ( 式 1 2 ) ) を例にとり、以下の第 1 ~ 第 3 のシミュレーションを行った。 30

【 0 0 3 4 】

図 3 及び図 4 を参照して第 1 のシミュレーションについて説明する。第 1 のシミュレーションは、ポテンシャルパラメータ D と、ヤング率 E との関係を確認するシミュレーションである。

【 0 0 3 5 】

銅の M o r s e ポテンシャルのポテンシャルパラメータは、 $r_0 = 0.2866$  ( n m )、 $D = 0.3429$  ( e V )、 $A = 13.588$  ( 1 / n m ) である。第 1 のシミュレーションにおいては、ポテンシャルパラメータ  $r_0$  及び A を上記一定値とし、ポテンシャルパラメータ D を変化させて、ヤング率 E の変化を調べた。 40

【 0 0 3 6 】

図 3 に、第 1 のシミュレーションモデルを示す。第 1 のシミュレーションモデルは、規則正しく f c c 構造をなすように配列した銅原子が、全体として直方体状の結晶を形成している。[ 1 0 0 ]、[ 0 1 0 ]、[ 0 0 1 ] 方向をそれぞれ x、y、z 方向とし、結晶のサイズは、x、y、z 方向に対して、 $1.448$  ( n m )、 $1.448$  ( n m )、 $1.810$  ( n m ) である。[ 1 0 0 ]、[ 0 1 0 ]、[ 0 0 1 ] はミラー指数によって表された方向指数である。更に、x 方向、y 方向の境界条件は、周期境界条件とした。

【 0 0 3 7 】

ヤング率 E は、引っ張り試験シミュレーションにより、図 3 に示した直方体状の結晶を 50

構成する銅原子の最上層を  $z$  方向に引っ張ったときの、直方体状の結晶全体の  $z$  方向への伸びから計算した。

【 0 0 3 8 】

図 4 は、第 1 のシミュレーションの結果を示すグラフである。グラフの横軸は、ポテンシャルパラメータ  $D$  を単位「 $eV$ 」で表し、縦軸は、ヤング率  $E$  を単位「 $GPa$ 」で表す。

【 0 0 3 9 】

本図に示す結果から、ヤング率  $E$  がポテンシャルパラメータ  $D$  に比例することが確認された。

【 0 0 4 0 】

図 5 及び図 6 を参照して第 2 のシミュレーションについて説明する。第 2 のシミュレーションは、ポテンシャルパラメータ  $r_0$  及び  $A$  と、ヤング率  $E$  との関係を確認するシミュレーションである。

【 0 0 4 1 】

第 2 のシミュレーションにおいては、ポテンシャルパラメータ  $D$  を一定とし、ポテンシャルパラメータ  $r_0$  及び  $A$  を、 $r_0$  と  $A$  との積を一定としつつ変化させて、ヤング率  $E$  の変化を調べた。すなわち、 $r_0$  を  $x r_0$ 、 $A$  を  $A/x$  とし、パラメータ  $x$  を変化させることで  $x r_0$  及び  $A/x$  を変化させて、ヤング率  $E$  と  $x$  との関係を調べた。

【 0 0 4 2 】

なお、銅の Morse ポテンシャルのパテンシャルパラメータ、 $r_0 = 0.2866$  (nm)、 $D = 0.3429$  (eV)、 $A = 13.588$  (1/nm) の値はそのまま用いた。

【 0 0 4 3 】

図 5 は、ポテンシャルパラメータを変化させる前後のポテンシャル  $\phi$  を示すグラフである。グラフの横軸は、基点原子 ( $r = 0$  の位置に存在する原子) からの距離  $r$  を単位「m」で表し、グラフの縦軸はポテンシャル  $\phi$  を単位「eV」で表す。

【 0 0 4 4 】

曲線  $p(r)$  はパラメータを変化させない場合 ( $x = 1$  の場合) の基点原子からの距離  $r$  とポテンシャルとの関係を示す。曲線  $q(r)$  はパラメータを変化させた場合の基点原子からの距離  $r$  とポテンシャルとの関係を示す。曲線  $q(r)$  は、 $x = 2$  としたとき、すなわち  $r_0$  を  $2 r_0$ 、 $A$  を  $A/2$  としたときの関係を示すグラフである。

【 0 0 4 5 】

$P_1$ 、 $P_2$ 、 $P_3$  はそれぞれポテンシャルパラメータを変化させない場合 ( $x = 1$  の場合) における、基点原子に最も近い原子、2 番めに近い原子、3 番めに近い原子の原子位置 (基点原子からの距離) を表す。

【 0 0 4 6 】

また、 $Q_1$ 、 $Q_2$ 、 $Q_3$  はそれぞれ  $x = 2$  としてポテンシャルパラメータを変化させた場合における、基点原子に最も近い原子、2 番めに近い原子、3 番めに近い原子の原子位置 (基点原子からの距離) を表す。

【 0 0 4 7 】

パラメータ  $r_0$  を  $x r_0$ 、 $A$  を  $A/x$  と変化させることは、1 次元的に考えたとき、 $x$  の値にかかわらず、基点原子に  $t$  番め ( $t = 1, 2, 3$ ) に近い原子のポテンシャル値を、変化前後でそれぞれ常に同一に保つ、という意味を有する。たとえば、図 5 においては、 $p(P_1) = q(Q_1)$ 、 $p(P_2) = q(Q_2)$ 、 $p(P_3) = q(Q_3)$  の関係が満たされるように、ポテンシャルパラメータ  $r_0$  及び  $A$  は変化されることになる。また、 $x$  の値にかかわらず、変化前の  $r$  におけるポテンシャル値と、変化後の  $x r$  におけるポテンシャル値とを同一とすることを意味する。

【 0 0 4 8 】

第 2 のシミュレーションにおいても、第 1 のシミュレーションと同様の引っ張り試験シミュレーションモデルを用いてシミュレーションを行った。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 4 9 】

図 6 は、第 2 のシミュレーションの結果を示すグラフである。グラフの横軸は  $1 / x^3$  を表し、縦軸はヤング率  $E$  を単位「GPa」で表す。

## 【 0 0 5 0 】

本図に示す結果から、ヤング率  $E$  が  $1 / x^3$  に比例することが確認される。このことはヤング率  $E$  が、 $A^2 / r_0$  に比例することをも意味する。

## 【 0 0 5 1 】

最後に、第 3 のシミュレーションについて説明する。第 3 のシミュレーションにおいては、 $r_0$  を  $x r_0$ 、 $A$  を  $A / x$ 、 $D$  を  $x^3 D$  として、パラメータ  $x$  を変化させ、ヤング率  $E$  と  $x$  との関係を調べた。

## 【 0 0 5 2 】

第 3 のシミュレーションにおいても、第 1 及び第 2 のシミュレーションと同様の引っ張り試験シミュレーションモデルを用いた。また、第 2 のシミュレーション同様、銅の Morse ポテンシャルのパラメータ、 $r_0 = 0.2866$  (nm)、 $D = 0.3429$  (eV)、 $A = 13.588$  (1/nm) の値はそのまま用いた。

## 【 0 0 5 3 】

図 7 は、第 3 のシミュレーションの結果を示すグラフである。グラフの横軸は  $x$  を表し、縦軸はヤング率  $E$  を単位「GPa」で表す。グラフには、W、Cr、Fe、Pt、Cu、Al、及び Pb の各金属のヤング率を書き入れてある。

## 【 0 0 5 4 】

本図に示す結果から、ヤング率  $E$  は  $x$  の値に関らず、ほぼ一定に保たれることが確認される。第 3 のシミュレーションで計算されたヤング率  $E$  の値は、実際の銅 (Cu) のヤング率に接近し、Pt や Al、その他の金属のヤング率と混同を生じさせるものではないこともわかる。また、第 3 のシミュレーションの結果は、ヤング率  $E$  が、 $DA^2 / r_0$  に比例 (比例定数は約 1) することをも示している。

## 【 0 0 5 5 】

第 3 のシミュレーションの結果から、ヤング率を一定としたまま、 $r_0$ 、 $A$ 、 $D$  のポテンシャルパラメータを変更して種々のシミュレーションを行うことができることが理解される。たとえばヤング率を一定に保ったまま  $r_0$  を大きくし、種々のシミュレーションを行うことができる。

## 【 0 0 5 6 】

図 8 を参照して、実施例によるシミュレーション方法を説明する。

## 【 0 0 5 7 】

ステップ S 101 において、シミュレーション対象の材料を構成する粒子の二体間ポテンシャル  $\phi$  を、ポテンシャルが最小となる距離に対応するパラメータ  $r_0$ 、ポテンシャルの形状を規定するパラメータ  $C_0$  を用い、2 つの粒子の中心間距離  $r$  の関数  $\phi(r, r_0, C_0)$  として決定する。

## 【 0 0 5 8 】

たとえばシミュレーション対象の材料が銅である場合、二体間ポテンシャル  $\phi$  は、

$$\phi(r) = D(e^{-2A(r-r_0)} - 2 \times e^{-A(r-r_0)})$$

## 【 0 0 5 9 】

・ ・ ・ ( 1 1 )

で表され、 $r_0 = 0.2866$  (nm)、 $D = 0.3429$  (eV)、 $A = 13.588$  (1/nm) である。

## 【 0 0 6 0 】

10

20

30

40

50

次に、ステップ S 1 0 2 において、パラメータ  $r_0$  を、 $r_0$  とは異なる  $r_1$  に置き換えたとき、シミュレーション対象の材料、ここでは銅のヤング率の変化が抑制されるように、パラメータ  $C_0$  を  $C_1$  に置き換える。

【 0 0 6 1 】

たとえば最安定原子間距離  $r_0$  を 1 0 倍として、シミュレーションを行うのであれば、 $r_0$  を  $10 * r_0$  に置き換える。この置き換えに伴って、 $A$  を  $A / 10$ 、 $D$  を  $1000 * D$  に置き換える。

【 0 0 6 2 】

そして、ステップ S 1 0 3 において、新たなパラメータ  $r_1$  ( 実施例においては、 $10 * r_0$  ) と  $C_1$  ( 実施例においては、 $A / 10$ 、及び、 $1000 * D$  ) とで定義される二  
10

体間ポテンシャル  $\phi(r, r_1, C_1)$  を用いてシミュレーションを行う。

【 0 0 6 3 】

実施例によるシミュレーション方法によれば、高精度のシミュレーションを実現することができる。任意のヤング率に対し、ヤング率を変化させずにシミュレーションを行うことも可能である。

【 0 0 6 4 】

また、最安定原子間距離を任意に設定することができるため、多様なシミュレーションを実現することができる。

【 0 0 6 5 】

シミュレーションに要する種々の計算は、プログラムにより、コンピュータで実行する  
20

【 0 0 6 6 】

図 9 ( A ) は、実施例によるシミュレーション方法を実行するシミュレーション実行装置のシステム構成図であり、図 9 ( B ) は、当該装置により実行される処理のフローである。

【 0 0 6 7 】

まず、ステップ S 2 0 1 において、キーボードなどの入力装置から、シミュレーション対象の材料を構成する粒子の二体間ポテンシャルが最小となる距離に対応するパラメータ  $r_0$  を、 $r_0$  とは異なる  $r_1$  に置き換えるための情報を入力する。

【 0 0 6 8 】

たとえば、シミュレーション対象の材料が銅であること、及び、銅の最安定原子間距離  $r_0$  を 1 0 倍にしてシミュレーションを行うことを入力する。

【 0 0 6 9 】

ここでファイル装置のデータファイルには、たとえば銅の二体間ポテンシャルを示す  $Morse$  ポテンシャルにおいては、 $r_0 = 0.2866$  ( nm )、 $A = 13.588$  ( 1 / nm )、 $D = 0.3429$  ( eV ) であることが記録されている。

【 0 0 7 0 】

続いて、ステップ S 2 0 2 において、 $r_0$  を  $10 * r_0$  に置き換えたとき、シミュレーション対象の材料 ( 銅 ) のヤング率の変化が抑制されるように、 $Morse$  ポテンシャルの形状を規定するパラメータ  $A$  及び  $D$  を置き換える。  
40

【 0 0 7 1 】

たとえば中央処理装置は、メインメモリ中の制御プログラムの指令を受け、データファイルから上記数値を読み出し、シミュレーションを行うに当たっては、 $r_0 = 2.866$  ( nm )、 $A = 1.3588$  ( 1 / nm )、 $D = 342.9$  ( eV ) とすることを算出する。

【 0 0 7 2 】

そして、ステップ S 2 0 3 において、中央処理装置は、メインメモリ中の制御プログラムの指令を受け、銅で形成された対象につき、 $r_0 = 2.866$  ( nm )、 $D = 342.9$  ( eV )、 $A = 1.3588$  ( 1 / nm ) として、メインメモリに保存されているシミュレーション実行プログラムを実行し、シミュレーションを行う。シミュレーションの結  
50

果は、ディスプレイなどの出力装置を介して表示される。

【0073】

上述の説明においては、ステップS201において、シミュレーション対象の材料が銅であること、及び、銅の最安定原子間距離 $r_0$ を10倍にしてシミュレーションを行うことを入力したが、たとえば直接、 $r_0$  ( $r_1$ ) を2.866 (nm) としてシミュレーションを行うことが入力されてもよい。

【0074】

またステップS202において、 $A = 1.3588$  (1/nm)、 $D = 342.9$  (eV) とすることを算出したが、たとえばファイル装置に変換テーブルを記憶させておき、演算ではなく、 $r_0$  ( $r_1$ ) の値をもとに、参照してこれらの値を得ることも可能である。

10

【0075】

以上実施例に沿って本発明を説明したが、本発明はこれらに制限されるものではない。

【0076】

たとえばMorseポテンシャルの場合について、ヤング率Eとポテンシャルパラメータとの関係を検証したが、Lennard-Jonesポテンシャルその他の場合についても、同様に確認することが可能であろう。

【0077】

このため、Morseポテンシャル以外のポテンシャルで表される材料についても、たとえばヤング率を一定としたまま、ポテンシャルパラメータを変更して種々のシミュレーションを行うことができる。

20

【0078】

その他、種々の変更、改良、組み合わせ等が可能なことは当業者に自明であろう。

【産業上の利用可能性】

【0079】

様々なシミュレーション、殊に分子動力学シミュレーションに好適に利用することができる。

【図面の簡単な説明】

【0080】

【図1】二体間ポテンシャルを示す概略的なグラフである。

30

【図2】原子間のクロスセクションを示す図である。

【図3】第1のシミュレーションモデルを示す。

【図4】第1のシミュレーションの結果を示すグラフである。

【図5】ポテンシャルパラメータを変化させる前後のポテンシャル $\phi$ を示すグラフである。

【図6】第2のシミュレーションの結果を示すグラフである。

【図7】第3のシミュレーションの結果を示すグラフである。

【図8】実施例によるシミュレーション方法を説明するためのフローチャートである。

【図9】(A)は、シミュレーション実行装置のシステム構成図であり、(B)は、当該装置により実行される処理のフローである。

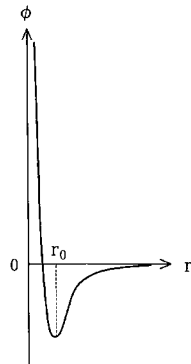
40

【符号の説明】

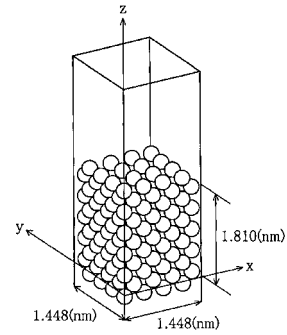
【0081】

S101、S102、S103、S201、S202、S203 ステップ

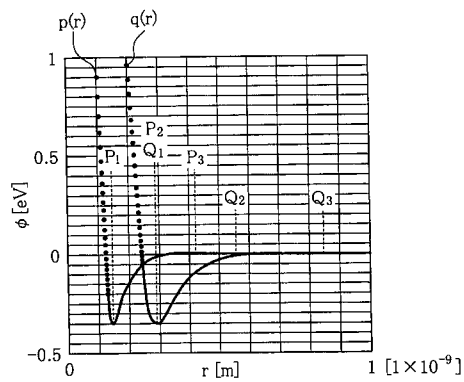
【図 1】



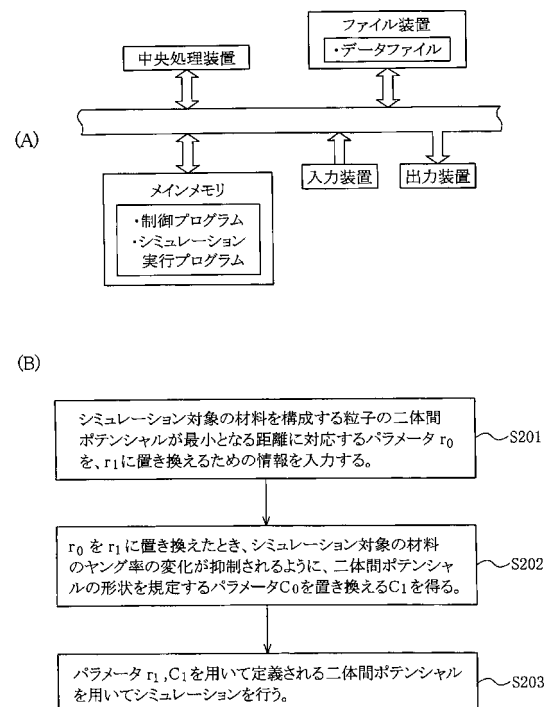
【図 3】



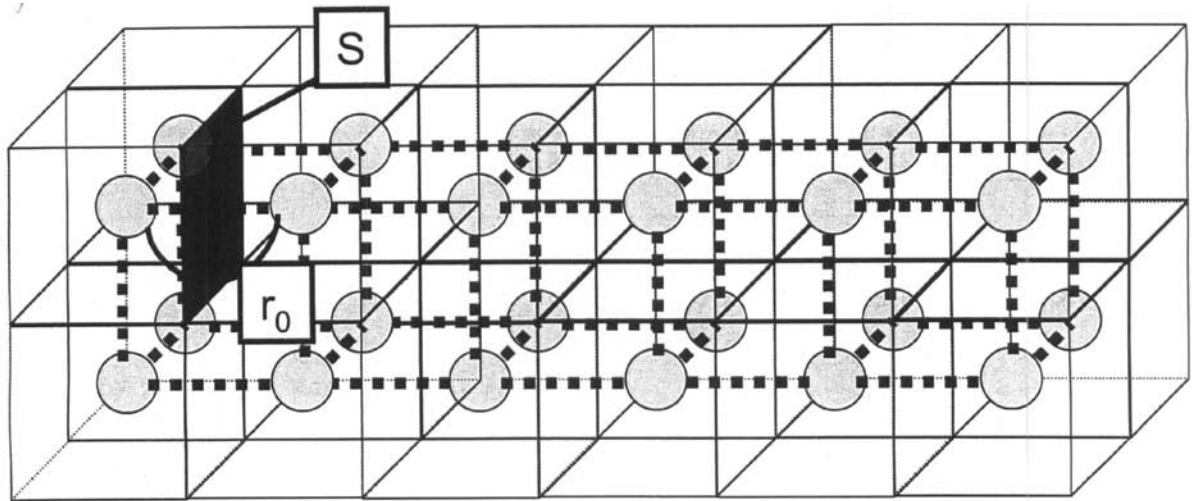
【図 5】



【図 9】

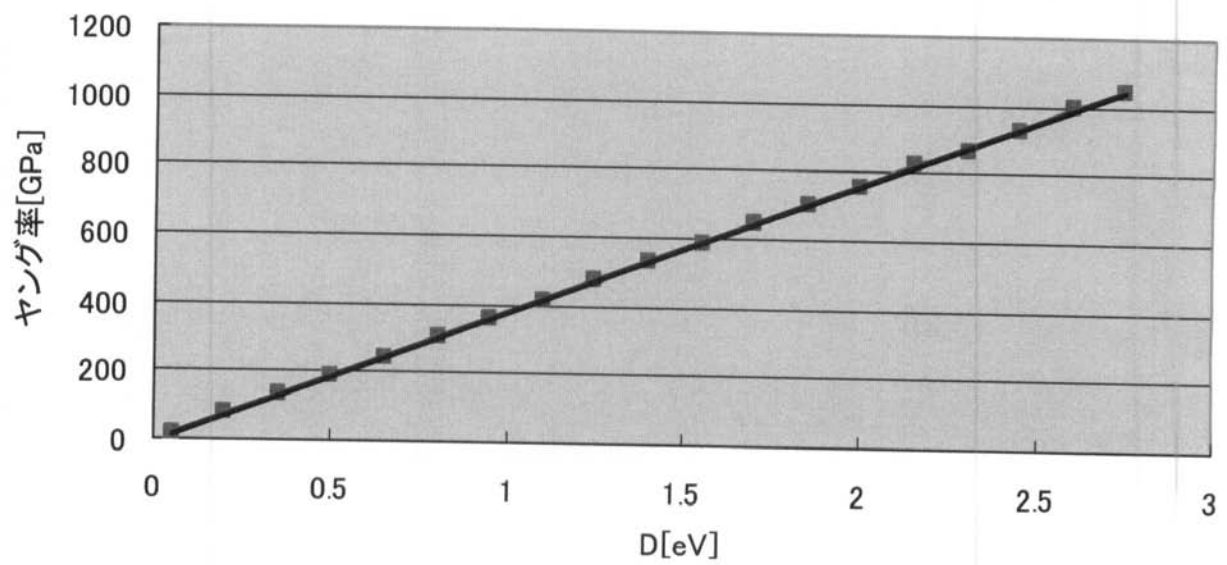


【図 2】

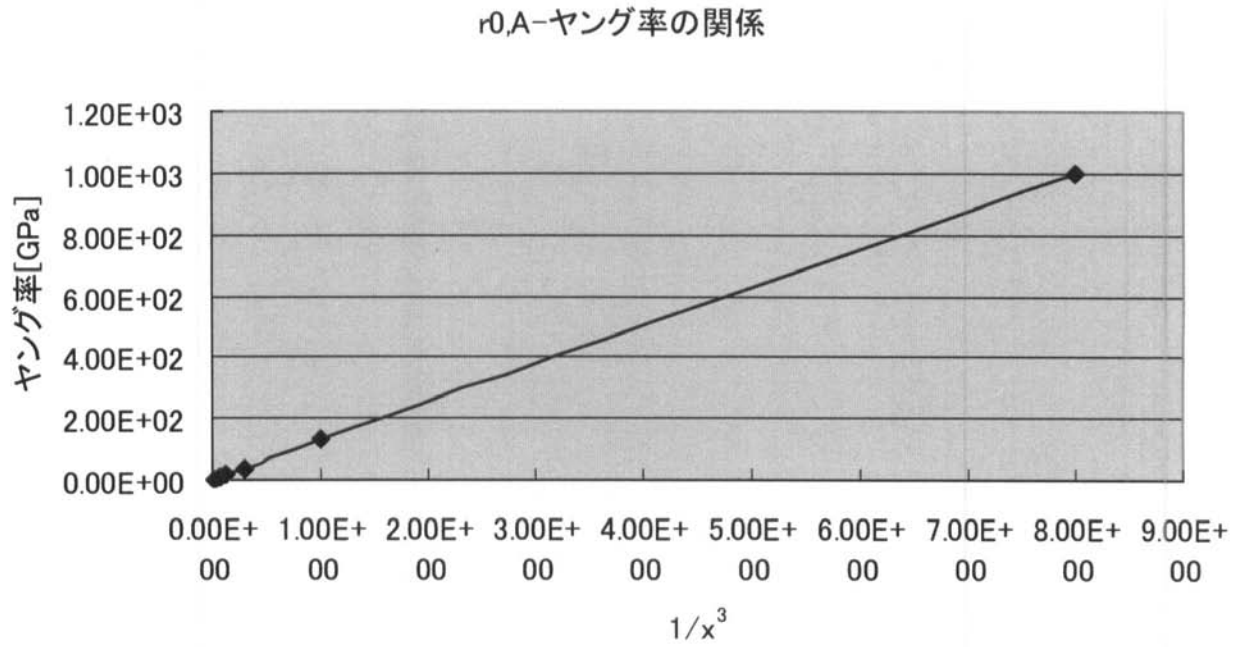


【図 4】

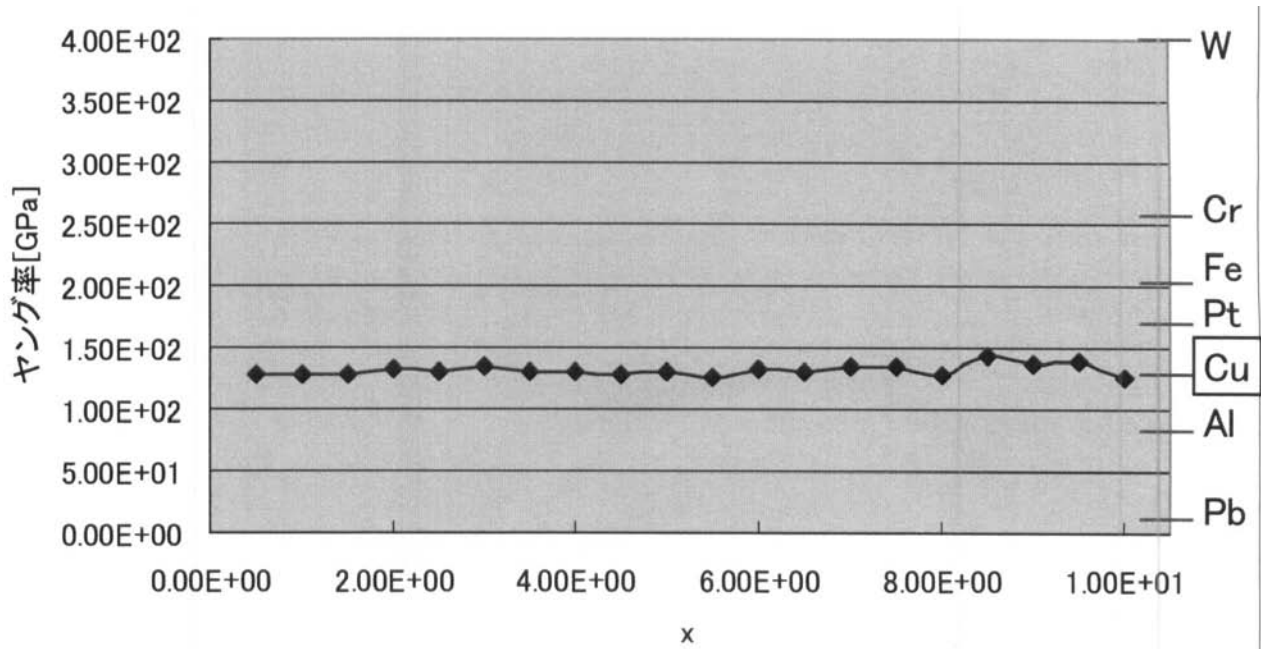
Dとヤング率の関係



【 図 6 】



【 図 7 】



【 図 8 】

