

論文の内容の要旨

論文題目 固体系における原子間ポテンシャル作成のための
枠組みの提案—共有結合・金属結合系への適用—

氏名 熊谷 知久

これまで、原子間ポテンシャルの不足が古典分子動力学普及の障害となってきた。特に近年では多元系や希少な元素系における原子間ポテンシャルへの需要が高まっているにもかかわらず、様々な系に対応できる原子間ポテンシャルの作成手法というのはないというのが現状である。このため、本論文においては、解析者が自分の目的に合わせて、簡易に原子間ポテンシャルを作成するための枠組みを提案した。提案した原子間ポテンシャル作成のための枠組みは計算目的の設定、ポテンシャル関数の決定、合わせ込みデータの選択/収集、ポテンシャルパラメータ最適化、ポテンシャルパラメータセットの評価/選択の工程からなる。また、なるべく実用に耐えるような原子間ポテンシャルを作成できるように各工程における経験的な指針も示した。提案した原子間ポテンシャル作成の枠組みを共有結合単元系(Si,B)、共有結合 2 元系(Si-B)、金属結合単元系(Zr,Ni)、金属結合 2 元系(Zr-Ni)に適用できることを確かめた。提案した原子間ポテンシャル作成の枠組みを用いることによって、融点の再現、拡散現象、クラスタリング現象の再現、アモルファス構造の再現できるような原子間ポテンシャルを作成することができた。将来的には枠組みの適用範囲の拡大、枠組みをもとにした汎用ソフトウェア化、枠組みを用いた原子間ポテンシャル情報の蓄積、多くの種類の原子間ポテンシャルを 1 つの解析に用いるような使用法の提案などを考えている。