

MARLOWE 二体衝突シミュレータのプリ・ポストプロセス

Development of pre- and post- processing programs for MARLOWE

○青木 学聡、瀬木 利夫、松尾 二郎 (京大工)

○Takaaki Aoki¹, Toshio Seki, Jiro Matsuo (Kyoto Univ.)

E-mail: aoki.takaaki.6v@kyoto-u.ac.jp

イオンビームと固体表面との相互作用の理解には、二体衝突モデル(Binarily Collision Approximation, BCA)の適用が極めて有効である。このため数十年来に渡り、BCA に基づくシミュレーションプログラムが数多く作成されてきた。中でも MARLOWE[1]は、高い自由度での結晶構造や結晶内欠陥の記述、欠陥構造の蓄積、衝突イベントの詳細な追跡等、特に無機材料結晶に対する BCA シミュレータとして現在も広く利用されている。その一方、多様なシミュレーションが実現できる分、MARLOWE の入力ファイルは複雑、かつ個々のパラメータが直観的ではない。加えて、出力データが機械可読形式ではない、といった設計の古さに起因する低いユーザビリティが指摘されている。我々は、MARLOWE のユーザビリティの向上を目的として、グラフィカルユーザーインターフェイス(GUI)による入力パラメータの編集、並びに出力データの再構成を行うプリ・ポストプロセスの作成に着手した[2]。

現在、入力パラメータ編集については、原子種、結晶構造、配位位置毎の占有確率、入射エネルギー等、BCA シミュレーションを実施する上で基本的なパラメータについては指定できる。また、GUI の内部状態は汎用の JSON 形式で保存、読み出すようにしている。これを MARLOWE 用の入力データ(FORTRAN の NAMELIST 形式)に変換後、MARLOWE 本体のプログラムを起動する。この機構により、多用なプログラム言語によるパラメータの自動生成とライブラリ化、他のイオン衝突シミュレータとのデータ交換等が実現できる。一方、出力データのポストプロセスについては、個々の衝突毎に、衝突の生じたサイトの座標、最終的な Interstitial、Vacancy の位置等を CSV ファイルとしてパース、出力する。

近年の計算機リソースの増大により、高エネルギーかつ大規模の BCA シミュレーションが個人の PC レベルで容易に実現できる環境となっている。本取組で開発したソフトウェア群により、MARLOWE の入出力プロセスを改善することで利用者、そして応用範囲の拡大が期待される。

[1] <http://www.oecd-neo.org/tools/abstract/detail/psr-0137/>

[2] <http://sakura.nucleng.kyoto-u.ac.jp/~aoki/mui/>