第一原理加速分子動力学法による Si 結晶中 Li 原子拡散の観察

Observation of Li diffusion in Si crystal by first-principles accelerated molecular dynamics simulation

パナソニック [1]，阪大院基礎工 [2]　○山本 昌裕 [1]，石井 明男 [2]，新里 秀平 [2]，尾方 成信 [2]

Panasonic Corporation [1], Osaka Univ [2],

°Masahiro Yamamoto[1], Akio Ishii[2], Shuhei Shinzato[2], Shigenobu Ogata[2]

E-mail: yamamoto.masahiro@jp.panasonic.com

【背景】

近年，注目を集めている技術分野として，自動車の自動運転，医療・介護機器，子育て支援，宇宙関連などがある．このような用途で用いられるデバイスは，従来の家電等の製品に用いられるものと比べて格段に高い信頼性が求められる．このためには，デバイス設計やプロセス設計の段階で十分に検討を行い信頼性を担保する必要があり，反応や加工のメカニズムを原子レベルから理解する必要がある．しかしながら，反応に伴う現象を観察するためには空間的にも時間的にも大規模な解析が必要となる．特に時間に関しては，分子動力学(MD)法計算がステップを追った逐次計算であるため，並列計算では解決ができず決定的な解決策がない．

この問題を解決するために我々は，系に boost potential を加えることによって反応を促進させる加速分子動力学法計算の開発を行い，Si 結晶中の Li 原子の拡散に適用した．

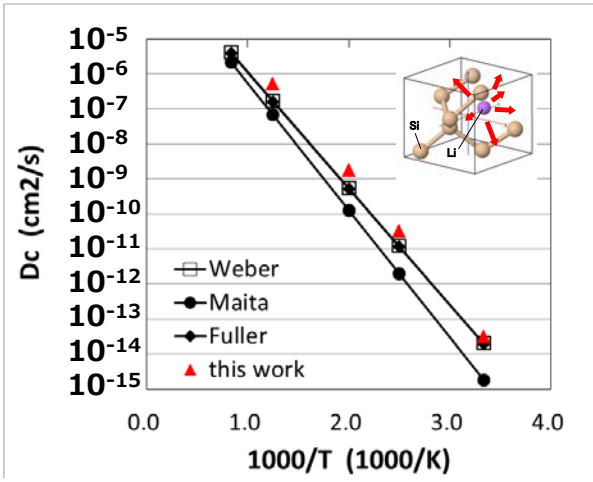
【計算手法】

Ishii らによって提案された Adaptive Boost (AB)法[1]を用いて加速計算を行った．AB 法では，一定 step 数の間 MD 計算を行い，その間にサンプリングされた energy surface に関する情報を基に boost potential を算出する．これにより，真の boost potential の形状がわかっていない場合でも，adaptive に決定することができる．また，拡散が生じるまでの実時間は，加えた boost potential から遷移状態理論に基づいて求めることができる．

今回， OpenMX に AB 法を実装し，初めて第一原理計算による AB 法 MD 計算を行った．Si 結晶中の Li 拡散を 300, 400, 500, 800K で観察し拡散係数を求め，実験値と比較した．

【結果】

結果を Fig.1 に示す. 得られた拡散係数は実験値と良い一致をし，アレニウス・プロットの傾きから求めた活性化エンタルピーは 0.688eV となった．今回は小さなモデルによる検討を行ったが，OpenMX は O(*N*)法の大規模計算が可能であるため，並列計算による大規模計算が期待できる． 講演では他の加速 MD 法計算の事例や，より大きなモデルを扱うために機械学習ポテンシャルを用いた結果についても報告を行う予定である．



Arrhenius plot of diffusivity of Li in Si crystal

【参考文献】

[1] A. Ishii, S. Ogata, H. Kimizuka and J. Li, Phys. Rev. B **85**, 064303 (2012)