

課題名 (タイトル) :

極限環境での状態変化：物質の理解から惑星深部へ

利用者氏名 :

○飯高敏晃

Nguyen Van Hong

John Sak Tse

鎌田誠司

河津励

鈴木鉄兵

Le The Anh

梅本幸一郎

所属 :

戎崎計算宇宙物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

人が生きる地表は、低温真空の宇宙空間と高温高圧の地球深部の狭間の薄皮であり、生命誕生の条件である地表に存在する適度な量の水は、膨大な地球深部鉱物に含まれる水（水素）との微妙なバランスの結果であるが、地球深部での水の存在形態を我々は未だ良く知らない。このような極限環境下では化学結合や周期律表などの概念すら全く変わってしまう未知の世界があり、リチウムが半導体になり、水素が金属になり超伝導にさえなる。本課題では、このような地球惑星進化の理解に資する極限環境下での物質探索と物性研究を目的とする。とくに、珪酸塩融体（マグマ）の知見は、地球科学上の数々の現象を理解するために究めて重要であるが、その特異な物性挙動は珪酸塩融体の短距離構造だけでなく珪酸塩融体が持つ中長距離の多階層ネットワーク構造、ナノ不均一性に由来すると考えられる。しかし、極限環境下の実験的測定、経験的分子動力学の適用には限界があり、密度汎関数法が扱える系の大きさは中長距離構造、ナノ不均一性の再現には小さすぎる。そこで平成 28 年 8 月に採択された [1] ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題 C [2] においては、ポスト「京」計算機とオーダー N 法密度汎関数法 [3] を用いた数千～数万原子系分子動力学計算を行うことによりはじめて可能になる信頼性の高い解析を目標の一つとしてい

る。

本課題では、その準備研究として、オーダー N 法密度汎関数法による NVT アンサンブル分子動力学計算の検証、および NPT アンサンブル分子動力学計算を行うためのストレステンソルのオーダー N 計算法の検証、古典分子動力学計算による珪酸塩融体のナノ構造の研究を行う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

上記の目的を達成するために、オーダー N 第一原理分子動力学法の代表的なプログラムの一つである CONQUEST に実装した NVT アンサンブル分子動力学計算を検証し、ストレステンソル計算の結果をエネルギー・体積曲線からもとめた圧力と比較し検証した。さらに、経験的 BKS ポテンシャルを用いた約 5 0 0 0 粒子の古典分子動力学法により SiO₂ 融体のナノ構造を調べた。

3. 結果

約 1 0 ps にわたる NVT アンサンブルオーダー N 第一原理分子動力学を安定に実行するための条件を明らかにした。従来法とオーダー N 法による圧力の計算結果を比較することにより、オーダー N ストレス計算法を使用するさいに注意すべき点を明らかにした。珪酸塩融体におけるナノ不均一性の存在を確かめた。

4. まとめ

今後4年間にわたるポスト「京」萌芽的課題を順調に進めるための予備的成果を挙げることができた。

5. 今後の計画・展望

平成29年度は、ポスト「京」萌芽的課題が本格的に稼働する。そのために配分される「京」の計算資源は限られているので、「京」と互換性の高くかつノードあたりの性能が高い greatwave-mpc の特徴を活かして「地球惑星深部物質の構造と物性」に関する成果を順調に挙げていきたい。

6. 利用がなかった場合の理由

一部のメンバーは、ポスト「京」萌芽的課題が採択されてから GreatWave に利用者登録をしたので、まだ計算の準備段階にあり実質的な大規模計算を行うに至っていないが、平成29年度より本格的に活用する予定である。

平成 28 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Tran Thuy Duong, Toshiaki Iitaka, Pham Khac Hung, Nguyen Van Hong, The first peak splitting of the Ge-Ge pair RDF in the correlation to network structure of GeO₂ under compression, Journal of Non-Crystalline Solids 459 (2017) 103–110.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2017.01.003>

Nguyen Van Hong, Toshiaki Iitaka, Pham Khac Hung "Structural organization, micro-phase separation and polyamorphism of liquid MgSiO₃ under compression", THE EUROPIAN PHYSICAL JOURNAL B Article:73 (2016)

<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2016-60740-4>

参考文献

- [1] 文部科学省, ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発の実施機関決定について, http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/28/06/1373171.htm
- [2] ポスト「京」萌芽的課題 1 サブ課題 C, 地球惑星深部物質の構造と物性, <http://www.iitaka.org/~xmat/>
- [3] D. R. Bowler, and T. Miyazaki, Reports on Progress in Physics **75**, 036503 (2012).
<http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/75/3/036503>