

動的モンテカルロ計算を効率化する千日手禁止法
Method omitting flicker events to efficiently perform kinetic Monte-Carlo simulation

伊藤 篤史^{1,2)}, 高山 有道^{1,2)}
 Atsushi M. Ito^{1,2)}, Arimihci Takayama^{1,2)}

¹⁾核融合研, ²⁾総研大
¹⁾NIFS, ²⁾SOKENDAI

ファズ構造とはヘリウム照射を受けたタンゲステン表面に誘起される繊維状のナノ構造である[1,2]。ファズの形成機構の中でも、ナノスケールの凹凸における表面拡散は議論的であり、成長への寄与については明らかになっていない。我々は分子シミュレーション手法を基本とし、分子動力学(MD)、二体衝突近似(BCA)、動的モンテカルロ(KMC)の三連ハイブリッド法を開発することでファズ形成機構の解明に取り組んできた[3]。しかし、三連ハイブリッド法においてはヘリウム原子の固体内拡散は扱っているものの、固体表面の表面拡散は扱っていない。

表面拡散の扱いには、理想的にはMDを用いるのが良いだろう。なぜならナノスケールの凹凸を持つ表面では必ずしも原子が規則的に並んでいない可能性があり、格子モンテカルロのようなモデル化が困難な為である。しかし、高温でない場合には、物質の構造変化に必要な時間が非常に長くなり、MDでは実用的に再現できない時間スケールとなる。そこで、非格子構造(任意構造)でも扱えるオンザフライKMCの開発を行っている。KMCのオブジェクトはMDと同様に原子そのものとし、原子がエネルギー極小点から近隣のエネルギー極小点にホッピングする移動現象をイベントとする。ここでのオンザフライの意味は、原子の移動経路をリアルタイムで探索することを指す。移動する原子を中心とした部分領域を切りだし、その中で規模の小さいMDを行うことで移動経路の探索とバリアエネルギーの算出を行う[4]。このようにすることで、非格子構造(任意構造)であってもKMCを実行することが可能になる。

さて、実用的にはKMCの実行時にはフリッカーイベントといわれる挙動が問題となる。これは大局的に変化を及ぼさないものの、高頻度で繰り返し発生してしまうイベントである。例え

ば、ダブルウェル型のトラップサイト内に留まり続ける原子の局所的な振動などがある。実用時間でのステップ数が有限である計算機においては、このようなイベントは実質的に「千日手」である。さらに、オンザフライKMCにおいては、従来の格子KMCよりも計算時間が掛かるために、千日手イベントは時間発展の妨げとなる。

そこで本研究では、このような千日手を禁止することでKMCを効率化する手法を理論的に構築した。ここでの千日手の禁止とは、同じ場所で同じ原子のフリッカーイベントが設定した閾値回数以上に起こった際に、千日手と認定することにして、以後はそのイベントを次の発生候補となるイベントのリストから外してしまうことを指す。その際に、千日手を禁止しない場合の本来の他のイベント発生確率と、千日手イベントを候補から取り除いた場合の他のイベントの発生確率が等しくなることを条件として、千日手を起こしていた原子の位置を決定する。

本手法では、イベントの発生確率だけでなく、KMCにおける経過時間の期待値に関しても、千日手を禁止の有無で辻褃が合う。その為、同じステップ数を計算した場合に、KMCで再現できる経過時間は、千日手を禁止した分だけ長くなることになる。実際にファズの表面拡散に適用したところ、経過時間は5倍から10倍になった。

- [1] S. Takamura, et al., *Plasma Fusion Res.* **1**, 051 (2006).
- [2] S. Kajita, et al., *Nucl. Fusion* **49**, 095005 (2009).
- [3] A. M. Ito, et al., *Plasma Fusion Res.* **13**, 3403061 (2018).
- [4] A. M. Ito, S. Kato, A. Takayama, and H. Nakamura, *Nucl. Mater. & Energy*, **12** (2017) 353-360.