

2001 電場下での大規模ダイナミクスシミュレーションを可能とする キネティックモンテカルロ法の開発

○久保百司¹、磯田直征¹、篠田克己¹、横須賀俊之¹、草谷友規¹、遠藤 明¹、宮本 明^{1,2}

¹東北大学大学院工学研究科材料化学専攻（〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07）

²東北大学未来科学技術共同研究センター（〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 04）

【緒言】

理論化学を活用した材料設計において、電場、磁場、力場、光などの外場によって、材料がどのように応答するかという外場応答性を解明することが次世代の理論化学にとって最も重要課題であると我々は考えている。著者らは既に電場下での電子状態ダイナミクス、化学反応ダイナミクスを解明することが可能な高速化量子分子動力学法の開発に成功している。一方、プラズマディスプレイの開発においては、強力な電場存在下における MgO 保護膜の劣化現象が大きな問題となっており、「どのような保護膜を作れば寿命が伸びるか」が最大の開発焦点となっている。そこで、著者らは上記の高速化量子分子動力学法を活用し、プラズマディスプレイにおける MgO 保護膜の電場下での劣化反応ダイナミクスを検討することで、プラズマディスプレイ用保護膜として最適な MgO 構造を予測することに成功した。

但し、高速化量子分子動力学法では第一原理分子動力学法に比較して 5000 倍以上の高速計算を実現することで数百原子を扱うことは可能にしたが、数万～数百万原子の大規模系に応用することは現状では難しい。そこで、本研究では数万～数百万原子の大規模系について電場下でのダイナミクスを計算可能なキネティックモンテカルロ法を開発した。

【方法】

大規模系において電場下でのダイナミクスシミュレーションを可能とするキネティックモンテカルロ計算プログラムを開発した。原子間力としては、クーロン項と近接交換反発項からなる 2 体間ポテンシャルを採用した。

【結果と考察】

実験的には、最も安定性の高い表面は MgO(100)面であると言われているが、著者らは以前の高速化量子分子動力学計算の結果より、量子ドット構造を有する MgO(111)面が、MgO(100)面に比較しさらに安定であり、プラズマディスプレイ用の保護膜として最適であることを予測している。そこで、MgO(100)面、MgO(110)面、通常の MgO(111)面、量子ドット構造を有する MgO(111)面などをモデル化し、電場下での表面構造の破壊ダイナミクスについて検討した。図 1 には量子ドット構造を有する MgO(111)表面に 0.1 V/Å の電場をかけてキネティックモンテカルロ計算を行った時の計算結果を示す。図 1 に示す量子ドットのような大きな単位の周期性を有する表面構造の計算には、量子分子動力学法の活用は困難であり、今回開発したキネティックモンテカルロ法が大規模系の計算に非常に有効であることが示唆された。図 1 においては、電場の印可により MgO(111)表面上の酸素原子や Mg 原子が蒸発し、表面構造の破壊が起こっていることがわかる。さらに、他の多くの表面構造についても、同様の計算を行うことで、プラズマディスプレイ用に最適な MgO 表面構造の設計を行った。

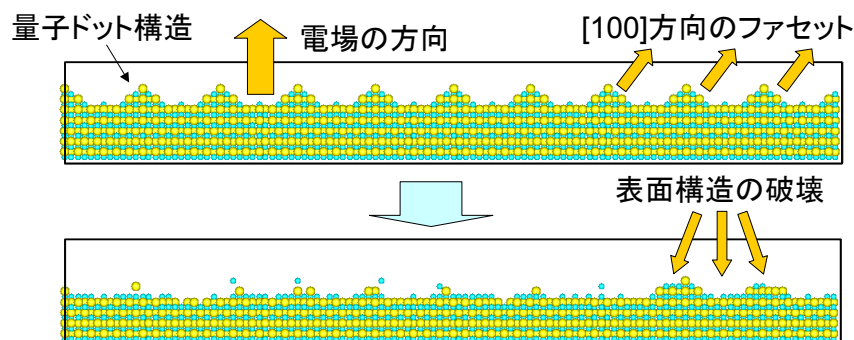


図 1 量子ドット構造を持つ MgO(111)面の電場による構造破壊ダイナミクス

