

大規模系モデルのための 古典・量子混成分子動力学プログラムの開発

○菅原健太郎¹、瀬戸川浩¹、三浦隆治¹、古山通久¹、久保百司^{1, 2}、宮本 明^{1, 3}

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

²科学技術振興機構さきがけ（〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8）

³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】 当研究室で開発した高速化量子分子動力学法は一般的な第一原理分子動力学法と比較して約 5000 倍の高速計算を実現し、数百原子系の化学反応ダイナミクスの解明を可能にした。更なる展開として大規模系への適用を試みているが、多数の原子について量子計算を行うことは実行時間の面で困難である。古典分子動力学ならば大規模系に適用することは可能だが、その結果から化学反応について論じることは難しい。そこで本研究では、モデル全体に古典計算を行い、反応に関わる重要な位置に存在する原子に量子計算を行うことによって、大規模モデルに対して化学反応を考慮した計算を適用可能にした Hybrid-Colors を開発した。

一方、金属の中に水素が溶け込むことで金属の強度が著しく低下する水素脆性は、材料研究の分野においては重要な問題である。そこで本研究では、新しく開発した Hybrid-Colors で水素を吸収させたパラジウムの破断の様子を計算することにより、水素が金属の強度に与える影響を考察した。

【方法】 Hybrid-Colors の量子計算部分には当研究室で開発した高速化量子分子動力学計算プログラム Colors を本研究用に調整して使用した。古典計算部分には当研究室で開発した分子動力学計算プログラム NEW-RYUDO をベースに本研究用に調整したプログラムを使用した。モデルは図 1、2 に示したような Pd₄₈ 原子の中に水素原子を 0~8 個混ぜたものを使用した。最上層の Pd を上方向へ 100 m/s の速さで移動させることでストレスを与え、水素原子の有無による Pd の破断の様子の違いを計算した。

【結果と考察】 Pd 原子は電子の数が多く、全原子に量子計算を適用すると莫大な時間を必要としてしまう。そこで今回は全水素原子と水素原子に近い中間層の Pd 原子に対して量子計算を行い、短時間で結果を得ることに成功した。最上層の Pd 原子にかかる z 軸方向の力を測定したところ、純 Pd では破断直前に大きな力がかかっていたことが計算によりわかった(図 3)。一方で、水素原子を含む Pd の系においては最上層の Pd にかかる z 軸方向の力は Pd が破断するに至るまで、なだらかに変化することが判明した。これらの計算結果より、Pd 中に水素 1 原子が存在することによって Pd の構造が破断し易くなり、外部のストレスによって容易に破断する様子を当研究室で開発した Hybrid-Colors で再現できることが示された。

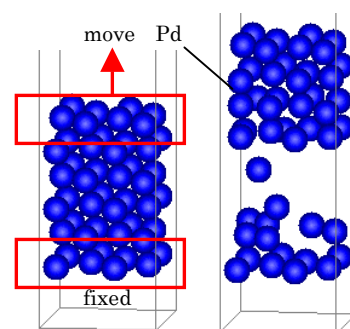


図1 Pd₄₈ モデルの初期構造と 5000 fs 後の構造。

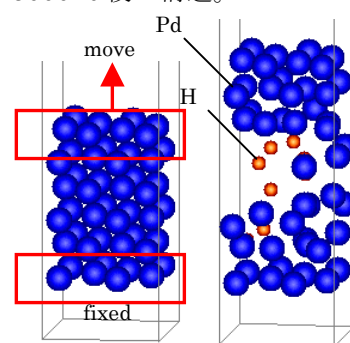


図 2 Pd₄₈H₈ モデルの初期構造と 5000 fs 後の構造。

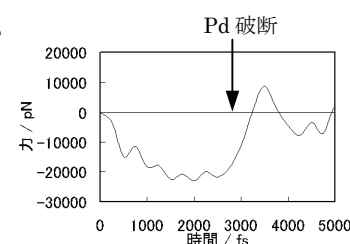


図3 Pd₄₈ の最上層の Pd₈ にかかる z 軸方向の力。