

超高速化量子分子動力学シミュレーションに基づく

マルチスケール表面トンネル電流シミュレータの開発

○坪井秀行¹、菊地宏美¹、芹澤和実¹、鈴木 愛²、Riadh Sahnoun¹、古山通久¹、
 畠山 望¹、遠藤 明¹、高羽洋充¹、Carlos A. Del Carpio¹、
 Ramesh C. Deka¹、久保百司¹、宮本 明^{1,2}

¹ 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

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 6-6-10)

³ 東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター
 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

【緒言】複雑な材料系の電子状態及び化学反応を量子分子動力学（量子 MD）シミュレーションにより理解することは材料設計に有効な知見を与える。本研究では従来の第一原理量子 MD 法に比べて約 1 千万倍高速化した超高速化量子 MD 計算スキームを開発し、MgO 表面の電子状態計算に適用した。また求めた MgO 表面の電子状態に基づいて表面電子放出シミュレーションを行った。

【方法】開発した超高速化量子 MD 法では、まず第一原理量子化学計算により求めた電荷・結合次数を再現するように Tight-Binding 量子 MD パラメータを決定した。次に Tight-Binding 量子 MD 計算を行い各原子の電荷と二原子間結合エネルギーを算出し、これを Coulomb 項及び Morse 項に用いることで量子 MD 計算の超高速化を実現した。また、開発した電子放出シミュレータでは Kinetic Monte Carlo (KMC) 法により電子移動をシミュレーションするとともに物質表面での Fowler-Nordheim 型トンネル電流を推算する電子放出特性推算スキームを採用した。

【結果】MgO 表面での電子状態を算出するため、まず Tight-Binding 量子 MD 法のパラメータを Mg32 原子、O32 原子からなる完全結晶バルクモデルを用いて、第一原理量子化学計算結果を再現するように作成した。作成したパラメータを用いて求めた Mg, O の電荷、Mg-O 間の平均結合エネルギーを表 1 に示す。表 1 から本パラメータにより、第一原理量子化学計算結果良く再現していることが分かる。

電子放出シミュレータでは超高速化量子 MD により求めた MgO(111) 表面のマイナスに帯電した状態の電子状態から、電子が真空に放出される過程を KMC 法により算出した。テスト計算には 50×50×3 セルモデルを用いた。計算結果を実験データとともに図 1 に示す。図 1 からわかるとおり本手法の結果は実験データとよく一致した値を示しており、本手法が Fowler-Nordheim 型の電子放出特性の予測に有効であることが示された。

表 1 作成したパラメータを用いた Tight-Binding 量子 MD 計算結果および第一原理量子化学計算結果

	電荷		結合エネルギー (kcal/mol)
	Mg	O	
Tight-Binding量子MD計算	0.389	-0.389	265.8
第一原理量子化学計算	0.399	-0.399	263.9

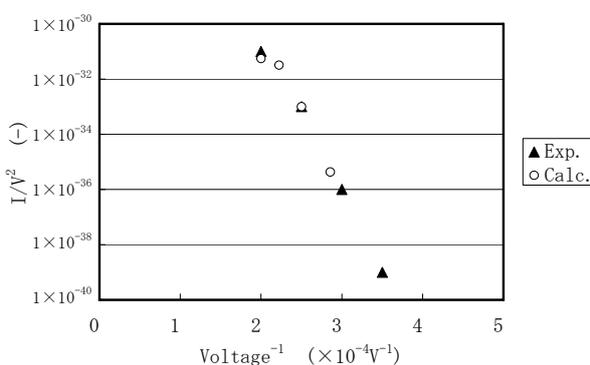


図 1 電子放出シミュレーション結果と実験値
 (M. S. Mousa, et al., *Ultramicroscopy*,
 79, 195 (1999))