

超高速化量子分子動力学法に基づく大規模化学反応シミュレーション

○高羽洋充¹、Hema Malani¹、石橋世子¹、鈴木 愛²、坪井秀行¹、古山通久¹、畠山 望¹、遠藤 明¹、Carlos Del Carpio¹、Ramesh C. Deka²、久保百司³、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】従来の第一原理的手法を用いた反応ダイナミクスの大規模シミュレーションでは、膨大な計算時間が必要となる。この問題点を克服するため、高速化量子計算を利用することで、従来よりも計算速度に優れた超高速化量子分子動力学法を開発し、種々の触媒反応系に応用した。

【方法】超高速化量子分子動力学法では、Tight-binding 計算により求められた結合エネルギーと原子電荷を、逐次分子動力学法計算に反映させることで、量子ダイナミクス計算の高速化を可能とした (図(a))。

【結果】超高速化量子分子動力学法を用いて、貴金属触媒上に吸着した NO 分子が、担体からの電子供与によって解離吸着していくダイナミクスの再現に成功している (図(b))。また、水素スピルオーバーでは、解離吸着後の動的挙動の解析にも成功した (図(c))。また、溶媒を含むメタロセン触媒重合反応のような大規模系への応用にも成功している (図(d))。このように、我々が開発した超高速化量子分子動力学法によって、複雑系の大規模化学反応の高速シミュレーションが可能になった。

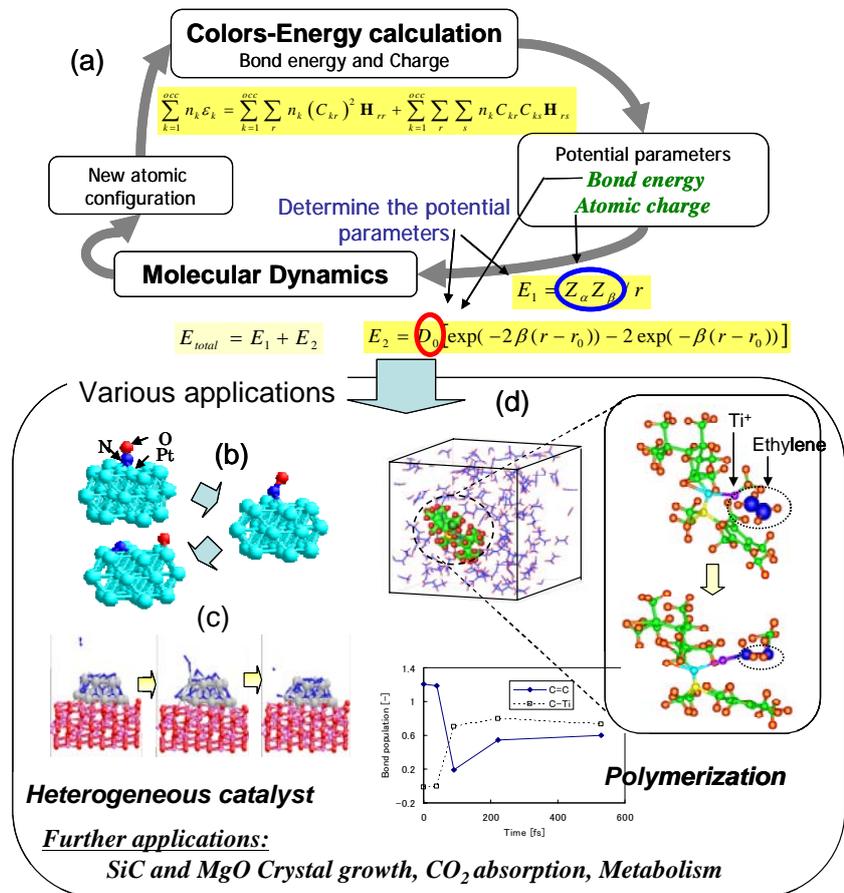


図 超高速化量子分子動力学法の概要と応用例。