

材料機能設計における電子論計算の限界とこれから

早大先進理工¹、京大 ESICB²、JST CREST³ 中井浩巳^{1,2,3}

nakai@waseda.jp

本発表者らは、CMSI 第3部会(分子機能と物質変換)の特別支援課題「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」において、大規模系に対する実用的な化学反応シミュレーション手法の開発を行ってきた。化学反応シミュレーションには、量子力学(QM)に基づき結合の生成・開裂や電子移動を扱い、分子動力学(MD)によりダイナミクスを扱う必要がある。すなわち、QM-MD シミュレーションが必要となる。さらに、ナノ・生体系には数千から数万原子系を取り扱える方法論が必要である。しかし、古典 MD 法と QM-MD 法では、取り扱えるサイズ(原子数)に大きな隔たりがあった(図 1) [1-5]。そこで本発表者らは、QM-MD のうち最も実用的な DFTB-MD 法に、線形スケールリング法の一つである分割統治(DC)法を適用することで目的を達成した(図 2) [4,6]。超並列環境にも対応したプログラムを開発することで、水 50 万分子のエネルギー計算が京コンピュータ 128,000 コアを用いて 40 秒程度で終了できるようになった(図 2)。

本発表では、DC-DFTB-MD 法を中心とした電子論計算が材料機能設計にどのように役立つか、具体例を示しながら説明する。また、現状での問題点を明らかにし、今後さらにどのような発展が必要となるかを議論する予定である。

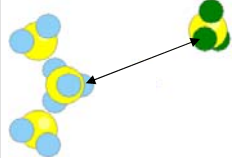
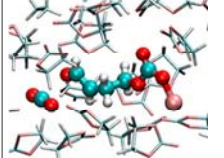
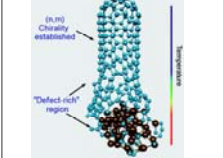
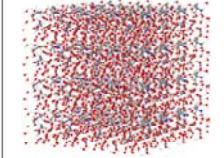
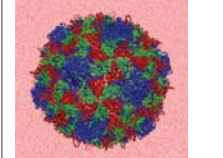
QM-MD				Classical MD
WFT	DFT	DFTB	DC-DFTB	MM
Cluster collision ^[1]	Electrolyte decomposition ^[2]	Growth of nanotube ^[3]	CO ₂ chemisorption ^[4]	Virus ^[5]
				
< 100	< 1,000	< 1,000	~100,000	~10,000,000

図 1. 各種 MD 法の適用例と原子サイズ

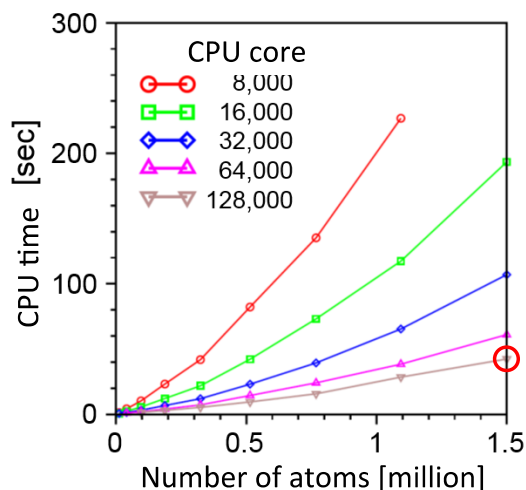


図 2. DC-DFTB 法を用いた水クラスターのエネルギー計算時間

- [1] H. Nakai, Y. Yamauchi, A. Matsuda, et al., *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **592**, 61 (2002).
- [2] K. Ushirogata, K. Sodeyama, Y. Okuno, Y. Tateyama, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 11967 (2013).
- [3] A. J. Page, Y. Ohta, S. Irle, K. Morokuma, *Acc. Chem. Res.* **43**, 1375 (2010).
- [4] H. Nakai, Y. Nishimura, T. Kaiho, T. Kubota, H. Sato, *Chem. Phys. Lett.* under review.
- [5] Y. Andoh, N. Yoshii, S. Okazaki, et al., *J. Chem. Phys.* **141**, 165101(2014).
- [6] H. Nishizawa, Y. Nishimura, M. Kobayashi, S. Irle, H. Nakai, in preparation.