

大規模量子分子動力学法に基づく実験融合構造解析シミュレータの開発

Development of Measurement-Integrated Structural Analysis Simulator Based on Large-Scale Quantum Molecular Dynamics Method

畠山望, 山下格, 鈴木愛, Riadh Sahnoun, 古山通久, 坪井秀行, 遠藤明, 高羽洋充,

Carlos A. Del Carpio, 久保百司, 宮本明

Nozomu Hatakeyama, Itaru Yamashita, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama,

Hideyuki Tsuboi, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Momoji Kubo,

Akira Miyamoto

(東北大)

(Tohoku Univ.)

e-mail: hatakeyama@aki.che.tohoku.ac.jp

量子論に基づいて「本物」の分子構造を描き出す, 実験融合シミュレーション手法の確立をめざして, X線回折(XRD), 中性子回折(ND), 広域 X 線吸収微細構造スペクトル(EXAFS)などの各種原子レベル構造解析シミュレータの開発を進めている. 独自に開発してきた大規模計算対応の量子分子動力学(MD)プログラムを用いて構築する大規模分子モデルの中から, どの測定手法でも実測値と一致するモデルを選び出すことにより, 対象とする物質を非常に精密に解析することが可能となる.

実験融合シミュレータの核となる超高速化量子 MD 法は, 当研究室で開発した Tight-binding 量子 MD プログラム Colors[1,2]と, 高速 MD プログラム RYUDO[3]のハイブリッドにより実現されている[4]. 小規模系では第一原理計算により求められる結合エネルギー, 電子状態, 結合次数を忠実に再現しながら, 数千原子規模の超高速な量子 MD 計算を実現している. また, 新規開発の XRD, ND, EXAFS シミュレータは, 数万原子規模の構造に対しても, 非常に高速な解析が可能となっている.

一般に構造解析が困難とされる, アモルファスに本手法を適用した一例を示す. 図 1(a)は, 超高速化量子 MD 法に基づいて計算された水の大規模構造である. 全4860原子のモデルであり, 電荷や結合次数, 結合エネルギーなどが非常に精密に計算されている. このモデルのスナップショットより求められた XRD および ND スペクトルを図 1(b)(c)に示している. 実測値とよく一致しており, 構造が「本物」であることを示している.

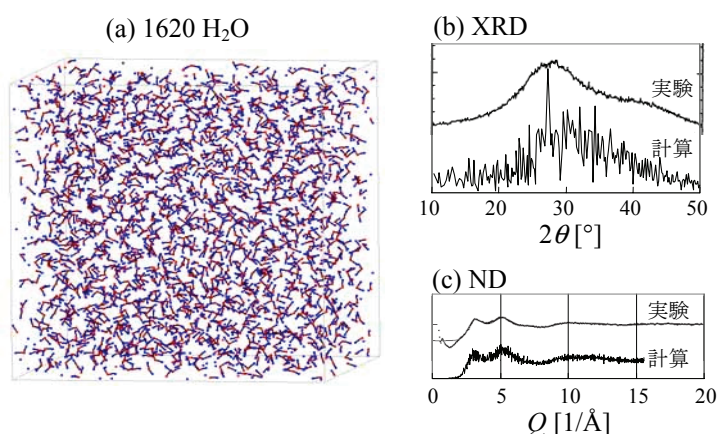


図1 量子論に基づく水の構造解析. (a) 大規模水分子モデル; (b) X線回折の実験値との比較; (c) 中性子線回折の実験値との比較

Reference

- [1] Elanany M. *et al.* (2003) *J.Phys.Chem.B*, **107**, 1518-1524
- [2] Suzuki A. *et al.* (2005) *Int. J. Quantum Chem.*, **102**, 318-327
- [3] Selvam P. *et al.* (2006) *Rev. Chem. Eng.*, **22**, 377-470
- [4] Endou A. *et al.* (2008) *Tribol. Online*, in press