

量子古典ハイブリッド型大規模数値解析手法の開発

金属材料技術研究所 計算材料研究部 大野 隆央

1. はじめに

現実の物質系の示す特性の多くは、電子状態の変化が重要なマイクロ領域、原子個々の運動が効くメソ領域と階層的な空間領域からの複雑な寄与で決定される。これら各領域に対して、それぞれ、量子論的分子動力学法（量子MD法）、古典論的分子動力学法（古典MD法）の解析手法が開発されているが、現実物質の全領域を1つの解析手法で統一的に解析することは困難である。本研究では、階層的な空間構造の各領域に量子MD法及び古典MD法の最適な解析手法を適用しつつ、各解析手法を統合した量子力学 - 古典力学ハイブリッド型の解析手法を開発した。量子MD法として、ab initio MD法は計算量が膨大であるため、本研究ではより計算量の少ないタイトバインディングMD法（TBMD法）プログラムを採用した。マイクロ領域に対してTBMD法を、メソ領域には経験的ポテンシャルを用いた古典MD法を適用する。TBMD法 - 古典MD法融合型プログラム及び可視化システムを開発し、Si系を対象にハイブリッド計算を行い、ハイブリッド型の解析手法の有効性を確認した。

2. 量子 - 古典融合型プログラム

量子 - 古典融合型プログラムは、TBMD法と古典MD法を階層的に結合したプログラムであり、TBMD法プログラム、古典MD法プログラムとしても実行可能である。表1に量子 - 古典融合型プログラムの主な機能を示す。

表1 量子-古典融合型プログラムの主な機能

項目	機能	
解析条件	境界条件	周期境界、自由境界
TB計算部	TB法モデル	GSPモデル（直交）[2]、DODモデル（非直交）[3]
	基底	直交、非直交
経験的ポテンシャル計算部	ポテンシャル・モデル	SWモデル[4]、 Tersoffモデル[5]、BKモデル[6]
運動方程式解法部	時間積分	Velocity-Verlet法、Verlet法
TBMD - 古典MD結合部	結合方法	開発した結合モデル TB計算領域の境界原子に水素を付加することが可能
	領域分割	固定、動的分割

3. 量子 - 古典融合型解析手法

3.1 結合手法の概要

全解析領域をTB領域、境界領域、古典MD領域に分割する。TB領域の原子の作用力はTB法を用いて計算し、MD領域は経験的ポテンシャルを、境界領域はTB法及び経験的ポテンシャルを用いて計算する。境界領域の相互作用力は、TB法による作用力と経験的ポテンシャルによる作用力から、結合モデルを用いて求める。動的領域分割を行う場合は、全原子に対して経験的ポテンシャルを用いて計算したポテンシャルによって、領域の選定・分割を行う。

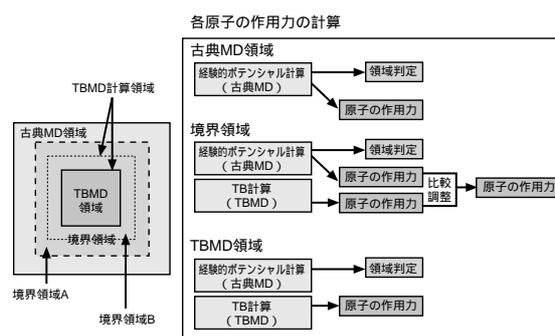


図1 領域分割と原子の作用力の計算
(カラー図は巻末資料参照)

3.2 結合モデル

境界領域内の原子の作用力は、TB計算による作用力と経験的ポテンシャルによる作用力から求める。TB計算による作用力と経験的ポテンシャルによる作用力との相違が小さくなるように、各モデルのパラメータを設定することが重要であるが現実的には困難である。また、TB法モデルのパラメータは、周期条件を前提にしているものが多く、自由境界に適用した場合、境界付近での計算結果に問題が生じる場合がある。そこで、既存のモデルが適用可能な結合手法を開発した。MD領域側の境界領域AとTB領域側の境界領域Bの2領域に分割し、境界領域Aの原子に対しては、経験的ポテンシャルによって求められた作用力を用いる。TB計算領域の境界部分での電子状態を考慮して、仮想的な水素を境界

の原子に付加することも試みているが、境界領域Aの範囲をカットオフ程度とることにより、TB計算領域の自由境界における問題の影響を小さくできる。境界領域Bの作用力は、TB法によって求められた作用力と経験的ポテンシャルに対し重み関数を用いて線形補間する。

表2 結合モデル（各領域の原子の作用力の計算方法）

領域	作用力	備考
MD領域	$F_{\text{global}}=F_{\text{MD}}$	
境界領域A	$F_{\text{global}}=F_{\text{MD}}$	
境界領域B	$F_{\text{global}}=(1-p)F_{\text{TB}}+pF_{\text{MD}}$	pは線形補間における重み関数
TB領域	$F_{\text{global}}=F_{\text{TB}}$	

3.3 領域分割

電子状態の変化が重要なマイクロ領域を原子の挙動にあわせて動的に選択する。経験的ポテンシャルを用いて全原子のポテンシャルを計算し、ポテンシャルからTB計算領域の中心を決定する。TB計算領域の中心から、TB領域、境界領域を設定する。

4. 可視化システム

量子MD - 古典MD融合型プログラムの入力データ、計算結果を可視化するための可視化システムを開発した。原子の座標、速度、領域、各種物理量等の可視化、プロットが可能である。

5. 量子MD - 古典MD融合型プログラムを用いたハイブリッド計算

Si原子を対象にして、亀裂伝播シミュレーションを行った。図2に、初期状態（0 fsec）と500 fsecの計算結果を示す。結合亀裂の進展とともにTB計算領域が移動しており、TB領域、MD領域、境界領域の原子の挙動は、単一の手法を用いた場合とほぼ一致していることから、本研究で開発した結合モデル、動的領域分割手法の有効性が確認できる。

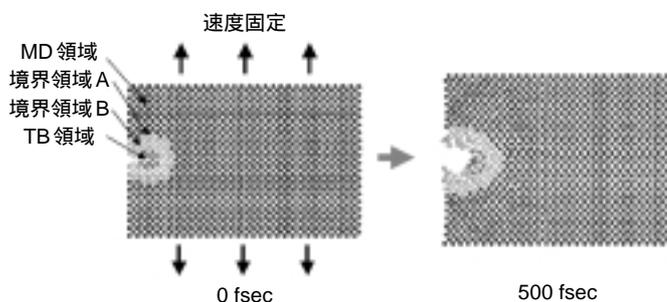


図2 量子MD - 古典MD融合型プログラムの計算結果
(カラー図は巻末資料参照)

参考文献

- [1] J.Q.Broughton et al, "Concurrent coupling of length scales: Methodology and application", Physical Review B, Vol.60, No.4, 1999
- [2] I.Kwon et al, "Transferable tight-binding models for silicon", Physical Review B, Vol.49, No.11, 1994
- [3] M.J.Mehl and D.A.Papaconstantopoulos, "Application of a tight-binding total-energy method for transition and noble metals: Elastic constants, vacancies, and surfaces of monatomic metals", Physical Review B, Vol 54, No.7, 1996
- [4] F.H.Stillinger and T.A.Weber, "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon", Physical Review B, Vol.31, No.8, 1985
- [5] J.Tersoff, "New empirical approach for the structure and energy of covalent system", Physical Review B, Vol.37, No.12, 1988
- [6] M.Z.Bazant and E.Kaxiras, "Modeling of Covalent Bonding in Solids by Inversion of Cohesive Energy Curves", Physical Review Letters, Vol.77, No.21, 1996

量子古典ハイブリッド型大規模数値解析手法の開発

金属材料技術研究所 計算材料研究部 大野 隆央

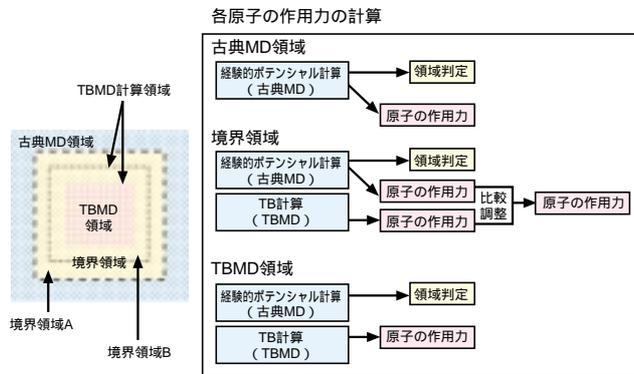


図1 領域分割と原子の作用力の計算

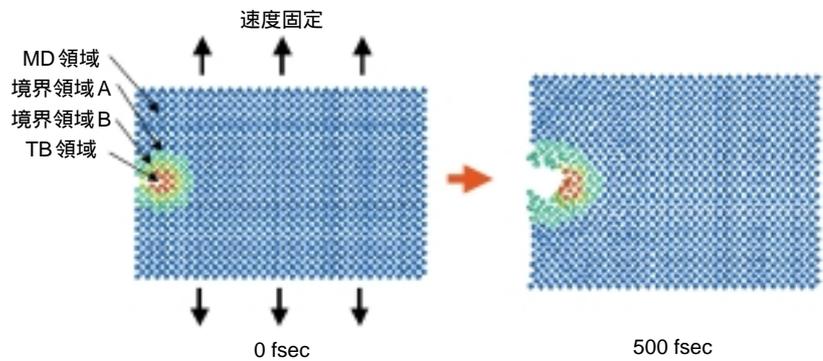


図2 量子MD - 古典MD融合型プログラムの計算結果

蛋白質の表面形状と物性に基づく機能分類

大阪大学蛋白質研究所 中村春木

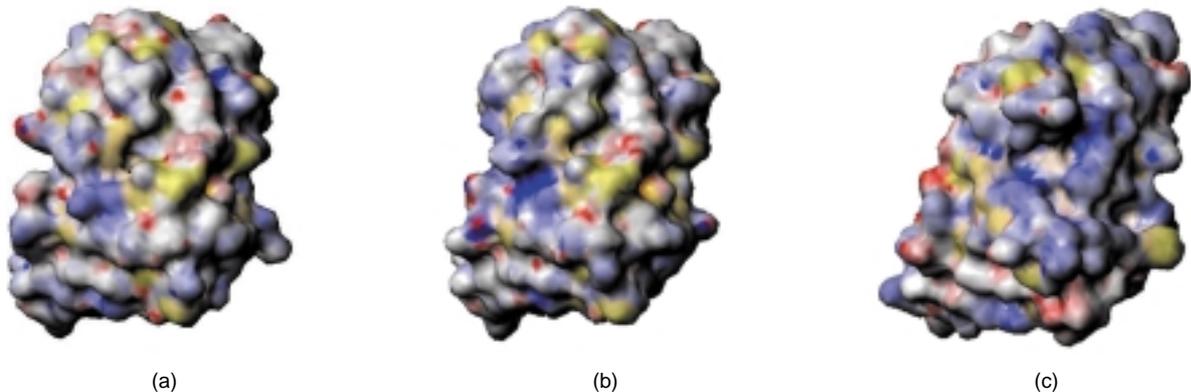


図1 抗体CDR部位の分子表面。青は正、赤は負の電位を表し、黄色は疎水性残基に対応する。(a)抗NP抗体 N1G9、(b)別の抗NP抗体B1 - 8、(c)1本鎖DNAを抗原とする抗体BV04-01

これは平成12年3月9日に開催した
計算科学技術活用型特定研究開発推進事業
研究報告会（主催 科学技術振興事業団）
の予稿集から抜粋したものです。