

MASAMUNE-IMR

Advanced science Supercomputing system for Advanced Materials simulation towards Next-generation solution for Materials Research

スパコンプロフェッショナル
Supercomputer Professional

令和2年 2月19日(水)
14:00~15:30

日時

場所

金属材料研究所
2号館1階ラウンジ

※お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法
~ユビキタス(遍在的)なプロトンを理解する~」



早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科

中井 浩巳 教授

水素(H/H₂)・プロトン(H⁺)・ヒドリド(H⁻)は、酸・塩基、酸化・還元、エネルギー変換・移動・貯蔵などの様々な機能を有しており、燃料、触媒、電池などありとあらゆるところで用いられている。学問的には、水素結合やpHなど基本的な概念だけでなく、¹H-NMRのように化合物の構造決定に不可欠な実験技術にも関係する。一方、プロトンが物質中で移動する現象を理論的に取り扱おうとすると、さまざまな困難がある。プロトン移動には結合の生成・開裂を伴うために、古典的な分子動力学(MD)法では取り扱えない。ユビキタス(遍在的)な性質が故に、一部を量子力学的に扱うQM/MM-MD法の適用も困難である。講演者のグループでは、全系を量子力学的に取り扱うことのできる分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法を提案し、さらに「京」コンピュ

ータなどの超並列環境に適したプログラムを開発して、この問題に取り組んできた。講演では、理論・プログラム開発に加えて、様々な環境下でのプロトン移動のシミュレーションについて紹介する。

主催 CCMS 東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター

協賛 計算物質科学 人材育成コンソーシアム

ポスト「京」萌芽的課題 「基礎科学の挑戦」

No.28

「MASAMUNE-IMR」は国立大学法人東北大学の登録商標です