

3E10 Gaussian & Fourier Transform (GFT) 法 における 解析微分法の開発および第一原理分子動力学法の研究

(東北大院工) ○島崎 智実、久保 百司

t-shimazaki@rift.mech.tohoku.ac.jp

分子の動力的振る舞いを調べることは、系の性質を明らかにする上で非常に重要である。特に近年、第一原理に基づいた分子動力学(MD)法がしばしば採用され大きな成果を挙げている。本研究では、密度汎関数理論(DFT)に基づいた第一原理 MD シミュレーションのためのアルゴリズムを開発し、また、プログラムコードへの実装を行ったので報告する。本研究で採用したアルゴリズムは、筆者らがこれまで固体バンド計算のために開発を行ってきた Gaussian & Fourier Transform (GFT)法を発展させたものである。GFT 法では、ガウス基底を採用しているが、平面波補助基底を用い、フーリエ変換と組み合わせることによりクーロン相互作用を高速に計算することが可能となっている[1-4]。本発表では、DFT-based 第一原理分子動力学法のために GFT 法の解析微分法を開発した。また、新たに開発した、再帰的積分ルーチンのアルゴリズムやフーリエ変換法に基づいた DFT 積分アルゴリズムの詳細についても議論を行う予定である。さらに、これらの新規なアルゴリズムに基づいた水分子の凝集系の DFT-based 第一原理 MD 計算について議論を行う。図 1a に MD 計算で求めたバルク水のスナップショットを示す。図 1b には O-H 間の動径分布関数 (RDF) を示す。図の実線は DFT によるものであり、点線は実験データである。図から分かるように DFT 計算は実験をよく再現していることが分かる。これらの詳細は当日に発表する。

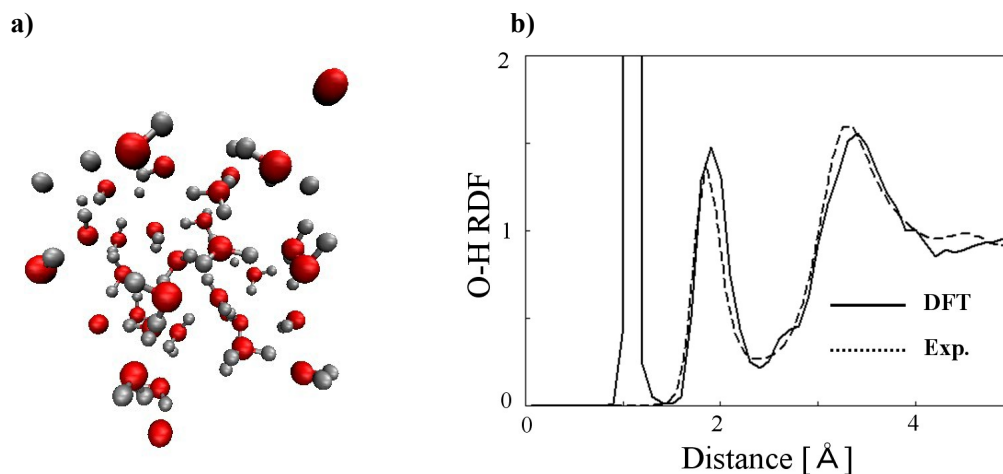


図 1 MD 計算のスナップショット(a) および バルク水の O-H RDF (b)

- 1) T. Shimazaki et al., *J. Chem. Theo. Comp.*, **5**, 136 (2009).
- 2) T. Shimazaki et al., *Chem. Phys. Lett.*, **466**, 92 (2008).
- 3) T. Shimazaki et al., *J. Chem. Phys.*, **130**, 164703 (2009).
- 4) T. Shimazaki et al., *J. Chem. Phys.*, **137**, 224105 (2010).