

3D09 フラグメントを用いた巨大分子の電子状態 計算法 —境界の取扱い方について

(三菱化学科学技術研究センター^a、JST-CREST^b、
豊橋技科大・知識情報^c)

○ 横島 智^{ab}、野中 尋史^c、浜田 信次^c、中村 振一郎^a、
関野 秀男^c

近年、計算機の能力の上昇と、様々な計算手法の開発により、巨大な系の電子状態計算が可能になりつつある。その応用分野には、生体分子やナノ工学材料などが見えてきており、これからの科学の発展にとって重要な役割を果たすと考えられる。こうした巨大系の電子状態計算を実現する上で重要な役割を果たしてきた計算手法には主に2つの流れがある。一つには、系全体の一電子密度行列に局在性があることを利用した Linear-scaling 計算法であり、もう一つは、系を適切な構成要素 (フラグメント) に分割して計算する手法である。本発表では、このうち後者について特に論じていきたい。

巨大分子の電子状態計算をその構成要素にわけて計算するという考え方は、多くの場合、各構成要素の電子状態をあわせたもので分子全体の電子状態がおおよそ与えられるという意味で物理的に見て自然である。特に重要な研究対象の一つである生体分子は、フラグメントを使った計算法が適した分子であると言えよう。しかしながら、構成要素の間をつなぐ継目部分をどう扱うかについて、それほど明解な処方箋があるわけではない。例えば、図1に示したような分子において、各フラグメントへの電荷の割り当て方などは計算手法によって異

なっている。また、計算精度をコントロールするのが難しいという問題点もある。本発表では各構成要素の境界部をどう扱うか、すなわちフラグメント間の継目を系統的に扱う方法について議論していく。

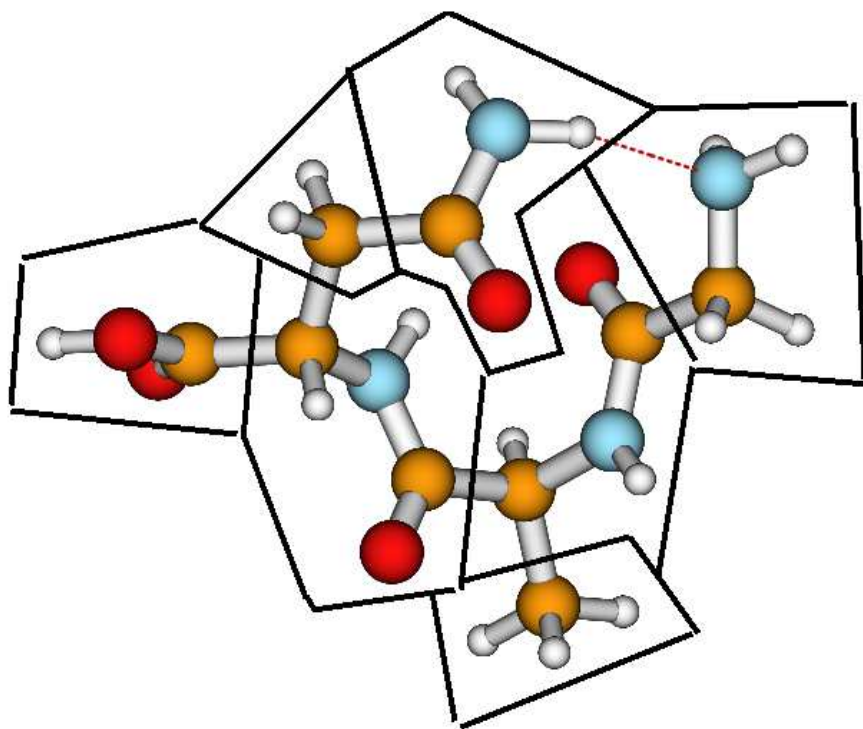


図1 フラグメント分割例