

GFT 法に基づいた DFT-based 第一原理分子動力学法の開発

○島崎智実、久保百司

東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-703)

固体中や表面、凝集系中での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、コンピュータの発達と共に第一原理に基づいた分子動力学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、DFT-based 第一原理分子動力学法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。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。図 1 は GFT の基礎方程式を示している。ここで、 χ はガウス基底を表す。図 1 にあるように、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、フーリエ変換とポアソン方程式を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[1-2]。GFT 法は基底としてガウス関数に基づいていることから、Gaussian03 や GAMESS 等の計算結果と直接の比較が可能である。また、GFT 法のための再帰的積分ルーチンのアルゴリズム[1]についても議論を行う。このアルゴリズムは、Obara-Saika(OS)法の直接の拡張になっていることにも言及する。さらに、当日は DFT-based 第一原理分子動力学法を行うために新たに開発した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。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 第一原理分子動力学計算について議論を行う (図 2)。

$$\nabla^2 V_{PE}^{valence}(\mathbf{r}) = -4\pi\rho_{Total}^{valence}(\mathbf{r})$$

$$\left[V_{PE}^{valence} \right]_{\alpha\beta} = \frac{1}{N_{FT}} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \frac{v_{PE}(\mathbf{G})}{G^2} \langle \chi_{\alpha} | \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) | \chi_{\beta} \rangle$$

Poisson equation
&
Fourier transform technique

図 1 GFT 法の基礎方程式 (χ はガウス基底)

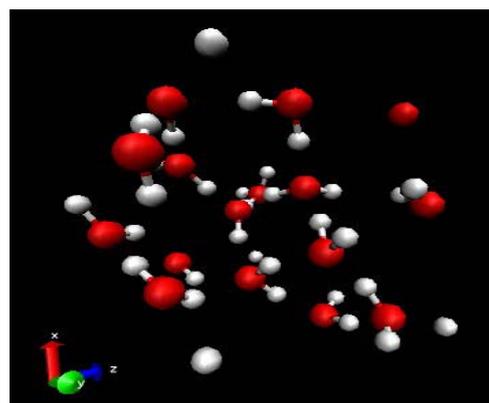


図 2 第一原理 MD のスナップショット

参考文献

- 1, T. Shimazaki et al., *J. Chem. Theo. Comp.*, **5**, p136, 2009.
- 2, T. Shimazaki et al., *J. Chem. Phys.*, **130**, 164702, 2009.