

新しい境界条件による有効遮蔽媒質法の拡張

Extensions of the effective screening medium method

濱田 幾太郎¹、杉野 修²、Nicephore Bonnet^{2,3}、大谷 実³

Minoru Otani¹, Nicephore Bonnet^{1,2}, Osamu Sugino²

¹物質・材料研究機構、²東京大学物性研究所、³産業技術総合研究所

¹National Institute for Materials Science, Tsukuba 305-0044, Japan.

²The University of Tokyo, The Institute for Solid State Physics, Kashiwa, 277-8581, Japan,

³National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tsukuba, 305-8568, Japan,

有効遮蔽媒質 (ESM) 法は電圧印可した電極界面の第一原理シミュレーションをスラブモデルと周期境界条件のもとで行うために開発された手法で、これまで様々な固・液界面や表面、分子などに適用されてきた。しかしながら、従来のESM法では分子系と媒質の誘電率が不連続に変化するため、分子系の電子密度がESMと重なる場合には数値的な不安定性が発生することも分かっている。そのため、電子密度とESMの重なりを避ける目的で、分子系とESMの間に真空領域を設けていた。さらに分子動力学シミュレーションにおいては、分子の真空領域への侵入を避けるために、人工的な斥力的ポテンシャルも導入する必要があった。

今回、分子系と ESM の間で滑らかに誘電率が変化する媒質を導入することで、電子密度と ESM が重なった場合の数値的な不安定性を解消することができた。さらに、新しい境界条件の下での ESM は分子に対して斥力的な壁として働くことも分かり、真空領域や斥力的ポテンシャルが不要になったため、ESM の枠内でより自然な電極界面のモデリングが可能になることが期待される。