

実時間-実空間法による電子-イオンダイナミクスの大規模並列計算

川下洋輔¹, 中務孝³, 矢花一浩^{1,2}

¹ 筑波大 数理物質科学研究科, ² 筑波大 計算科学研究センター, ³ 理研

kawashita@nucl.ph.tsukuba.ac.jp

概要: ナノサイズの物質を第一原理的に記述する手法として密度汎関数法は大きな成果を収めている。我々はこの密度汎関数法を電子のダイナミクスに拡張した時間依存密度汎関数法を用いて分子中の電子とイオンのダイナミクスを第一原理的に記述する手法を開発した。この手法では時間依存シュレーディンガー方程式を実時間、実空間で解くため、超並列計算向きの手法であり、ペタフロップス級のスーパーコンピュータを用いることにより、数百原子程度の電子-イオンダイナミクス計算が可能となり、ナノ、バイオ物質の記述が可能となる。本ポスターでは、現在行っている並列計算の一例として、レーザーによるアミノ酸のクーロン爆発に対する計算例を紹介する。

1 はじめに

たんぱく質などの生体分子はナノサイズの物質であり、そのようなサイズにおいて物質は量子力学の法則に従って運動している。このような量子論的な性質が顕著に現れる領域の物質を第一原理的に記述する手法として密度汎関数法(DFT)は大きな成功を収めている。DFTは電子状態を記述する理論であるが、DFTによって記述された電子状態を考慮してイオンダイナミクスを古典的に記述するといった第一原理分子動力学を用いた研究も盛んに行われている。現在ではDFTを用いて記述することの出来る物質のサイズは数千~数万原子にまで到達している。

このようにDFTは大変な成功を収めた手法であるが、これによって記述することの出来る範囲は電子基底状態に制限される。従って第一原理分子動力学においてもイオンダイナミクスの記述は電子が基底状態にある場合のエネルギーポテンシャル面内の運動に制限される。しかし、電子励起を伴う分子反応も様々な局面で重要である。例えば光合成や視覚の過程では、生体分子の電子励起を伴う光応答が本質的であり、様々な化学的、工学的応用が期待されている。この場合、電子は基底状態に留まっているわけではなく、様々な励起状態に遷移し、ダイナミックな運動をしている。このような電子ダイナミクスを第一原理的に記述する手法として時間依存密度汎関数法(TDDFT)は

大きな注目を集めている。TDDFTを用いることによって、DFTでは不可能であった電子励起状態及び、非線形電子ダイナミクスの第一原理的な記述が可能となり、またそれに伴うイオンダイナミクスの記述も行うことが出来る。

我々はこのTDDFTを用いた第一原理的な手法で電子及びイオンのダイナミクスの記述を行うことによって、ナノ物質世界の仕組みを解明する試みを行っている。

2 電子-イオンダイナミクスの記述に対する第一原理的な手法

我々はTDDFTを用いた電子とイオンのダイナミクスの記述に際して、具体的な手法として実空間法と実時間法という手法を用いた。実空間法とは計算空間を三次元格子に分割し、基本方程式を実空間差分法によって解き進める手法である。実空間法に関しては、理研の次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトのターゲットアプリケーションの一つである岩田氏の開発したRSDFTと共通のプラットフォームである。また、CPU間の通信に関しては隣接通信が主となるため、通信の効率が良いのも特徴である。実空間法、実時間法におけるサイズスケールは実空間の拡張に伴って使用するCPUの数を増やすことにする、つまり1CPUあたりの格子点の数を一定にしたならば、計算に関しては $O(N)$ であり、通信に関しても $O(N)$ でスケールする。つまり、我々の用いている

手法は並列計算機向きの手法であると言える。現在我々は効率的な並列コードの開発を進行中で、筑波大学の PACS-CS 並列計算機で様々なテスト計算を行っている。256CPU を用いた場合、計算時間対通信時間の比は約 3:1 となっており、良い並列化効率を有している。

3 レーザー照射による生体分子のクーロン爆発

現在、レーザー技術は目覚ましい発展を遂げており、高強度化、超短パルス化されたレーザーパルスを用いて様々な研究がなされている。強レーザーを用いることによって分子の配向のコントロールや、分子結合の選択的な解離といった分子コントロールに関する研究は盛んに行われている。また X 線自由電子レーザー(XFEL)を用いてたんぱく質の構造解析を行うといったことも計画されている。

このような光と分子の相互作用において当然のことながら電子は静的な基底状態ではなく動的な励起状態へと遷移しており、我々の開発した手法はこのような現象を記述するのに適している。

今回我々は光と分子の相互作用に対するシミュレーションの一例として、アミノ酸(グリシン)に強レーザーパルスを照射した場合のクーロン爆発の結果を示す。一行目の四枚のパネルはイオンの運動の様子を示している。二、三行目のパネルは C,O,N の作る平面での電子密度の時間変化を示している。レーザーによってイオン化が起こり、まず最初に水素が爆発を起こし、その後他のイオンも爆発を起こしはじめていく様子がわかる。

4 まとめ

量子論的な性質が顕著に現れるナノ物質における電子ダイナミクスを記述する方法として TDDFT は適した手法である。我々の用いた実空間法、実時間法はサイズスケールが $O(N)$ であるため、超並列計算に威力を発揮する。今回我々は計算の一例としてアミノ酸の結果を示したが、ペタフロップス級の超並列スーパーコンピュータを用いることによって、数百原子の生体分子に対して第一原理的なシミュレーションをすることが可能となるであろう。

