

汎用原子レベルシミュレータ Matlantis へのフラグメント分割法の適用と大規模系への応用

(早大先進理工¹・早大理工総研²・ENEOS 株式会社³) 大島 玲生¹・藤波 美起登²・中嶋 裕也³・中井 浩巳^{1,2}

Application of fragmentation method to versatile atomistic simulator Matlantis for large-scale systems (¹Department of Chemistry and Biochemistry, Graduate School of Advanced Science and Engineering, Waseda University, ²Waseda Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, ³ENEOS Corporation) ○ Rei Oshima,¹ Mikito Fujinami,² Yuya Nakajima,³ Hiromi Nakai^{1,2}

MatlantisTM is a versatile atomic-level simulator using a neural network potential trained on density functional theory (DFT) calculations, achieving DFT-level accuracy efficiently. However, its application to large-scale systems is limited due to restrictions on the number of atoms. This study extends Matlantis to large-scale systems by employing a fragment-based approach, approximating total energy using an expansion formula based on fragment interactions. Comparison with bulk systems confirms the validity of the proposed method.

Keywords : Fragmentation method; Matlantis; Neural network potential

MatlantisTM[1,2]は密度汎関数理論(DFT)計算の結果を学習したニューラルネットワークポテンシャルに基づく汎用原子レベルシミュレータである。DFT に匹敵する精度の計算を高速に実現するが、取り扱い可能な原子数の制約から大規模系への適用が困難であった。本研究ではフラグメント分割法[3]を適用することで、Matlantis を用いた大規模系の計算を可能とすることを目指した。フラグメント分割法では、式(1)の多体展開に基づいて、全エネルギー E を N_f 個のフラグメントから近似的に算出する。

$$E = \sum_I^{N_f} E_I + \sum_{I>J}^{N_f} (E_{IJ} - E_I - E_J) + \sum_{I>J>K}^{N_f} \{ (E_{IJK} - E_I - E_J - E_K) - (E_{IJ} - E_I - E_J) - (E_{JK} - E_J - E_K) - (E_{KI} - E_K - E_I) \} + \dots \quad (1)$$

ここで、 E_I は各フラグメントの全エネルギー、 E_{IJ} は2つのフラグメント I, J の全エネルギー、 E_{IJK} は3つのフラグメント I, J, K の全エネルギーを表す。式(1)右辺の第 n 項まで計算することで n 体の相互作用を取り込むことができる。六方晶窒化ホウ素の単位格子から異なる原子数のスーパーセルを作成し、全エネルギーを式(1)により近似的に求めた。単位格子をフラグメントとした。Fig. 1は、1原子あたりのエネルギーの周期境界条件(PBC)のエネルギーからの差 ΔE_{atom} とスーパーセル内の原子数 N_{atom} の関係を示す。Refは式(1)を用いず通常のMatlantisの取り扱いによる結果を表し、最も小さいスーパーセルのみ計算可能である。2,3体の相互作用を取り込むことで、 ΔE_{atom} はRefと同程度まで小さくなった。また、Refが計算不可能な大規模系についても、原子数の増加に伴って ΔE_{atom} が減少する正しい挙動を示した。

[1] S. Takamoto, et al., *Nat. Commun.* **13**, 2991 (2022). [2] Matlantis(<https://matlantis.com/>), software as a service style material discovery tool. [3] D. Hankins; J. W. Moskowitz; F. H. Stillinger, *J. Chem. Phys.* **53**, 4544 (1970).

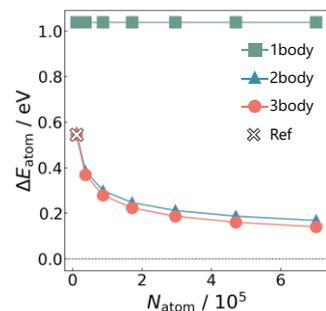


Fig. 1. Relationship between the number of atoms and deviation from PBC energy.