

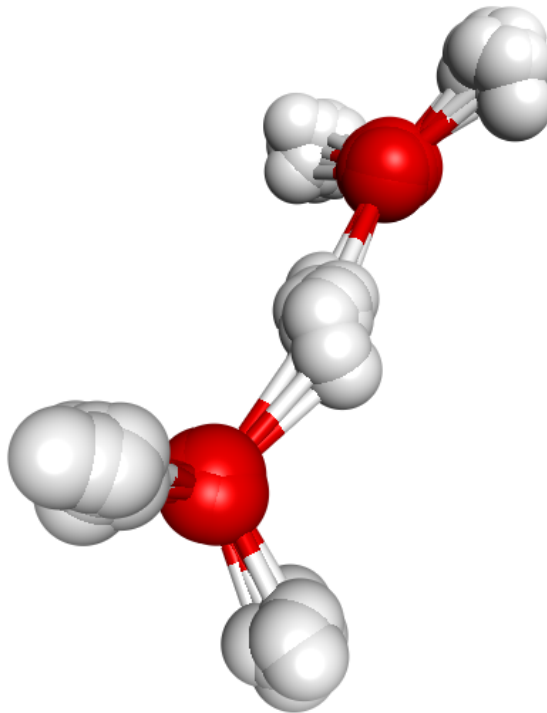
# 経路積分分子動力学法 (PIMD)

## 1.1. 計算設定

以下のように設定した。

- Method: PIMD
- Ensemble: NVT (canonical ensemble)
- Potential: SMASH (b3lyp/cc-pvdz)
- Number of beads: 16
- Boundary: free boundary condition
- System: protonated water dimer

以下にスナップショットを示す。



## 1.2. 結果

以下のように、各ステップにおける全エネルギー、ポテンシャルエネルギー、瞬間温度、計算時刻が“standard.out”に出力される。

step	energy [au]	potential [au]	temp [K]	wall clock time
0	-152.18893397	-153.07017355	300.00	2016-04-25 月 09:12:32.28
1	-152.18894445	-153.07123665	302.08	2016-04-25 月 09:12:55.69
2	-152.18896233	-153.07337533	307.25	2016-04-25 月 09:13:18.87
3	-152.18898309	-153.07630145	314.45	2016-04-25 月 09:13:42.26
4	-152.18900223	-153.07961072	320.76	2016-04-25 月 09:14:05.64
5	-152.18901748	-153.08290248	324.19	2016-04-25 月 09:14:29.18
6	-152.18902891	-153.08590948	325.73	2016-04-25 月 09:14:52.62
7	-152.18903723	-153.08851938	326.82	2016-04-25 月 09:15:15.31
8	-152.18904302	-153.09070411	327.54	2016-04-25 月 09:15:38.60
9	-152.18904660	-153.09245733	327.80	2016-04-25 月 09:16:01.40
10	-152.18904804	-153.09377275	327.60	2016-04-25 月 09:16:24.70

・・・以下、略・・・

次ページの図は水素結合ゆらぎを示すもので、縦軸を  $\Delta r_{OH}$  (下図参照)、横軸を  $r_{OO}$  とした二次元分布である。

