

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

AA&S 古典分子動力学法計算ソルバー

[商品紹介]

古典分子動力学法(以下、単に、分子動力学法と呼ぶ)は、系を構成する分子や原子一つ一つの古典力学的運動を元に、系の集団的振る舞いを調べる手法です。例えば、凝縮系・流体系のマクロな物性値(比熱、弾性定数、熱伝導率など)や相転移現象、生体高分子のような巨大分子の安定構造の決定、動的挙動の解析などの研究に広く用いられております。また、この手法は、実験が困難な環境での現象の解明はもちろんのこと、新素材のもつ物性を実験に頼らず予測することができます。よって、分子設計や材料設計にも用いることが可能です。

本カタログでは、弊社の保有する、分子動力学法における解析技術を紹介いたします。以下に述べますように計算原理は非常に単純ですので、計算例として挙げたもの以外の系につきましても、お客様のご要望に叶うソルバーをお作りすることが可能となっております。弊社では、文献調査の段階からのご依頼を承っておりますので、まずはお

気軽にご相談ください。

[対象となる系]

凝縮系 流体系 ナノマテリアル 生体高分子 など

[解析例]

- 安定構造
- 動的挙動
- 相転移(融解、結晶化、表面再構成、凝縮、蒸発)
- 物性値(比熱、電気伝導度、弾性定数、熱伝導率、拡散係数、粘性係数)
- 力学的特性(摩擦、ひっぱり、変形、ひび割れ) など

弊社 古典分子動力学法計算ソルバー
(問題に応じてカスタマイズ可能)

研究成果
分子設計
材料設計

【計算方法】

この手法では、系を構成する分子や原子を質点と考え、その運動がニュートンの運動方程式に従うと考えます。つまり、質点の位置の変化は、ある時点での位置と速度と働く力から求められます。これを全ての粒子について、時々刻々計算することで系の発展を捉え、マクロな性質を引き出します。粒子間の相互作用としては、

- レナード・ジョーンズ
- スティリンジャー・ウェーバー
- ターソフ

などによる有効ポテンシャルを、運動方程式の解法としては

- (速度)ベルレ法
- シンプレクティック法

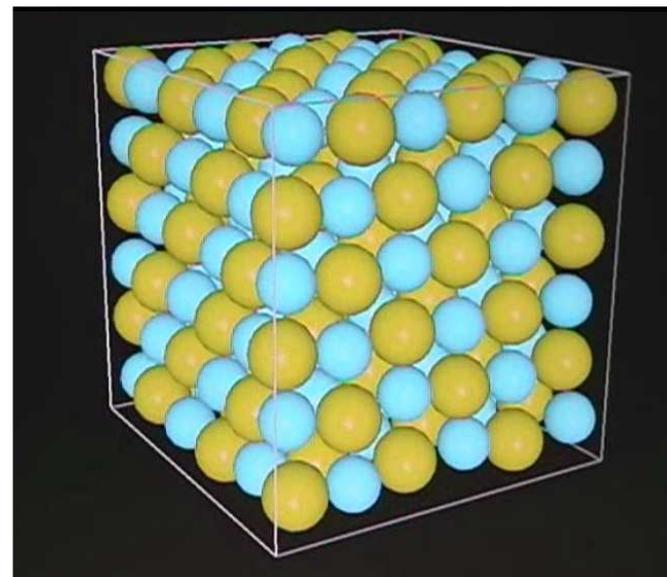
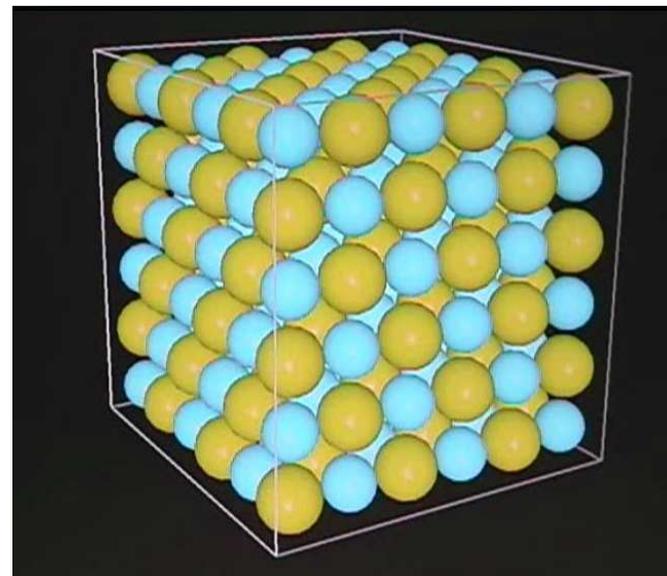
などを用いています。また、エwald法による長距離力の計算も取り入れております。

分子動力学法は、その手法自体も広く研究されており、上記のもの以外のポテンシャルや解法、さらには、温度を一定に保つといった、系の環境を制御する技術なども開発されております。弊社では、お客様の問題に適切なものを調査し組み込むことが可能となっております。

【計算例 1 …塩化ナトリウム結晶中のイオンの運動】

モデルケースとして、融点直下(1100K)の塩化ナトリウム結晶(格子定数 5.63 \AA)中でのナトリウムイオンと塩化物イオンの運動について紹介します。クーロン力に斥力を加えた形の相互作用ポテンシャルを用い、ベルレ法によってニュートンの運動方程式を解いています。

紙面では運動の様子を詳しくお見せすることができませんが、弊社ウェブページではムービーにてご覧になれます。また、この他にも、ソーダガラスやフラーレン(カーボン 60)中の原子の運動の様子もご覧いただけます。



運動の様子を可視化したムービーのスナップショット。水色：ナトリウムイオン、黄色：塩化物イオン。

[計算例 2…ソレー効果のシミュレーション]

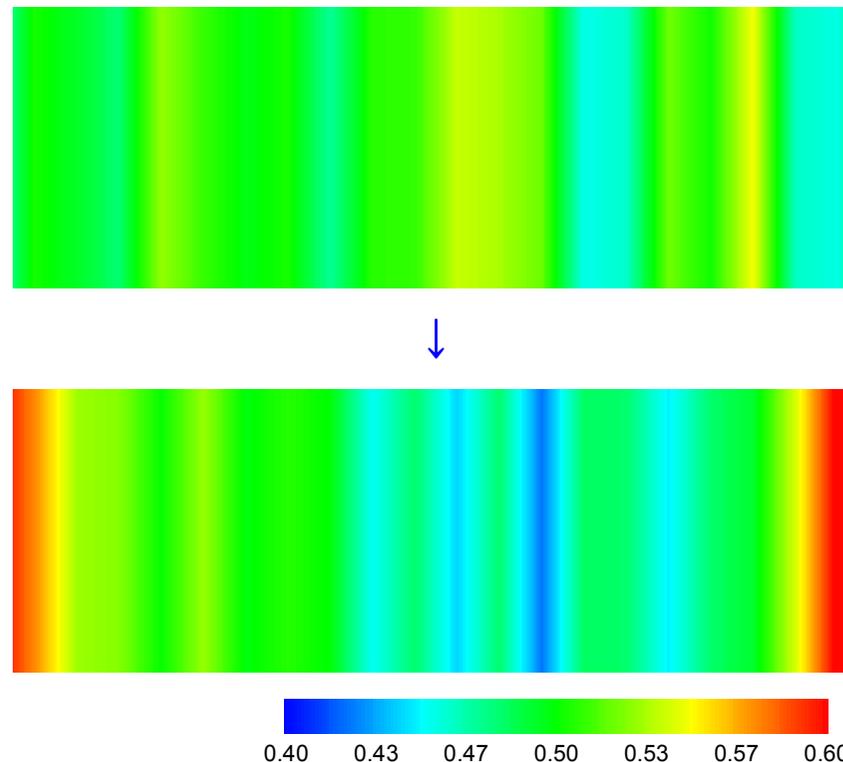
もう一つの応用例として、非平衡系に分子動力学計算を用いた例を紹介いたします。

多成分からなる系では、濃度勾配を減少させるように成分の交換が起こりますが、温度勾配が存在することでも成分の交換が起こります。特に、温度勾配を安定に維持させると、安定な濃度勾配が形成されることが知られております。これはソレー効果と呼ばれており、同位元素の分離などへの応用が考えられている現象です。

以下では、質量比が 2 : 1 である二成分の粒子からなる混合液体の系について、この効果を確認するために行ったシミュレーションの例を紹介いたします。系を熱浴に入れ、系に温度勾配を与えるための操作を行っていること以外は、「計算例 1」とほぼ同様な計算を行っております。

この例では、図の横方向の中央部を高温に、両端を低温に制御しておりますが、重い粒子は低温側へ、軽い粒子は高温側へと移動する傾向にあることが分かります。

弊社ウェブページには、他のパラメータを用いた際の計算結果や重力場を考慮した場合の計算結果、ソレー効果を特徴づける温度輸送係数の推定値などについての報告書載せてありますので、ぜひご覧ください。



計算開始付近、および、1,000,000 ステップ（およそ 4 ns）後付近の、重い粒子のモル分率。（紙面に垂直な方向で平均化してある。また、直前 5,000 ステップのデータから求めた時間平均値でもある。）粒子数は各 750 個、計算領域のサイズはおよそ 3 nm×3 nm×10 nm、周期境界条件。青、緑、赤の順に、重い粒子のモル分率が大きくなる。

[入出力のデータ]

入力：

- 構成粒子の性質(質量、相互作用ポテンシャルの関数形やパラメータの値など)
- 粒子数
- シミュレーション空間のサイズ
- 時間ステップ幅およびステップ数など

出力：

- 全ての粒子の位置、速度、エネルギー(運動エネルギー、ポテンシャルエネルギー)
- それらの統計量から得られる物理量(系またはセル毎の温度、モル分率、拡散係数など)

[ソフトの状態]

[言語]

FortranおよびC++

[作業の流れ]

- ① 計算に必要なパラメータをテキストファイルにて設定
- ② コンパイラを用いてコンパイル
- ③ 計算を実行
- ④ 出力データを可視化
 - 「計算例1」のように、シミュレーションを行いながら運動の様子をリアルタイムで見られるようにすることが可能です。(この例ではOpenGL を用いています。)
 - 「計算例2」のように、物理量分布などのスナップショットを見るための出力データを、お手元の描画ソフトに合わせて作成いたします。

[計算結果サンプル]

弊社ウェブページではそのほかの計算例についても載せております。また、粒子の運動を可視化したムービーがございますので、ぜひご覧ください。

http://www.aasri.jp/pub/demo/demo/comp_result.html
内の「分子動力学計算コードでの計算例」の4項