

Mathematicaによる分子動力学

○山田 祐理¹、片岡 洋右²¹東京電機大学理工学部理工学科(〒350-0394 埼玉県比企郡鳩山町石坂)²法政大学生命科学部環境応用化学科(〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

【緒言】

これから分子動力学(MD)法を学ぶ初学者への入門のために, *Mathematica* を用いたプログラムを開発した。プログラムの簡便のため, 扱える系やアルゴリズムはごく基本的なものに限定した。立方体MDセル内の Lennard-Jones (LJ) 粒子系について, *NEV* または *NVT* の各アンサンブルによる計算が可能である。

【方法】

プログラムの開発には *Mathematica* 9.0.1.0 を用いた。プログラムの基本構造は成書(片岡, 1994)^[1] をもとにしている。運動方程式の数値積分には Verlet 法, *NVT* 計算における温度制御には速度スケール法を用いた。

LJ 粒子による fcc 単位格子を三次元方向にそれぞれ **nfcc** 個積み重ね(したがって系の粒子数は $4 \times \text{nfcc}^3$ 個となる), そこから各粒子の位置をランダムに変位させた構造を初期配置とした。図1に **nfcc** = 4 (256 粒子系), 数密度 **numberDensity** = $0.6 \sigma^{-3}$ としたときの初期配置の例を示した。

計算の初期設定においては, **nfcc** と **numberDensity** のほかに, 温度(*NEV* 計算においては初期温度) **temp** / ϵk^{-1} , MD ステップ数 **nstep**, 計算時間刻み **dt** / τ などが指定できる。ただし, σ および ϵ は LJ パラメータ, k はボルツマン定数で, 時間を表す換算単位 τ は, LJ 粒子の質量 m を用いて $\tau = \sigma(m/\epsilon)^{1/2}$ と定義される。三次元周期境界条件を適用し, 分子間相互作用のカットオフ距離はセル幅の半分とした。

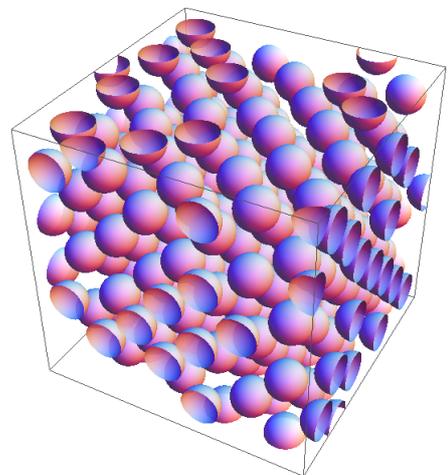


図1. **nfcc** = 4, **numberDensity** = $0.6 \sigma^{-3}$ における初期配置の例。

【結果】

nfcc = 4, **numberDensity** = $0.6 \sigma^{-3}$, **temp** = $1 \epsilon k^{-1}$, **nstep** = 1000, **dt** = 0.01τ における *NEV* 計算の例を示す。この温度密度では系は液体と考えられ, 実際二体相関関数や自己拡散係数は液体的な結果を示す。

図2には, 速度自己相関関数(velocity auto-correlation function; VAF)および平均二乗変位(mean square displacement; MSD)をプロットした。それぞれから求めた自己拡散係数 D は

$$\begin{aligned} \text{VAF より: } D &= 0.127 \sigma^2 \tau^{-1}, \\ \text{MSD より: } D &= 0.120 \sigma^2 \tau^{-1}. \end{aligned} \quad (1)$$

となり, 互いによく一致した。

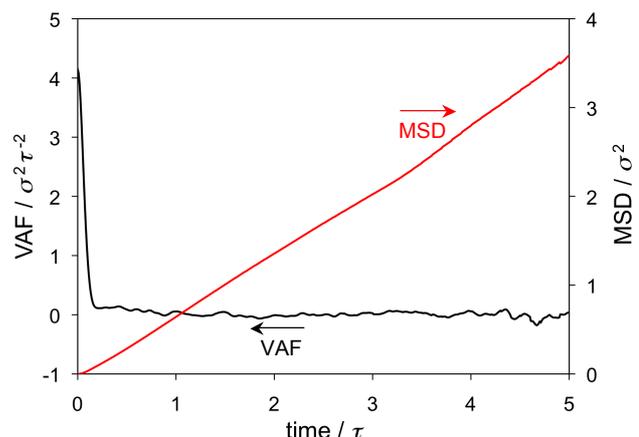


図2. 速度自己相関関数および平均二乗変位。

参考文献

[1] 片岡洋右, “計算化学シリーズ 分子動力学法とモンテカルロ法”, 講談社サイエンティフィク(1994).