

Mathematica による分子動力学

○山田 祐理^{1,2}, 片岡 洋右^{2,3}

¹ 東京電機大学工学部理学系 (〒350-0394 埼玉県比企郡鳩山町石坂)

² 法政大学情報メディア教育研究センター (〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

³ 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】

Wolfram *Mathematica* は「数式処理」システムであるのみならず、自然科学全般において幅広く活用しうる多くの機能を備えている。また、豊富な組み込み関数を持ち、プログラミング言語としても洗練されている。

我々はこの *Mathematica* を用い、分子動力学 (MD) 法をこれから学ぶ初学者を想定して、MD の入門プログラムを開発した。これは、以前に報告した Excel VBA による MD プログラム [1,2] と、目的も内容も共通している。MD 計算やその結果を解析するアルゴリズムを理解し易いように、分子間相互作用は Lennard-Jones 12-6 ポテンシャル、MD セルは立方体、初期配置は歪んだ fcc 構造、アンサンブルは *NEV* または *NVT* アンサンブルのみをそれぞれ扱うものとした。

Mathematica によるプログラムは、入出力も含めすべて一つのファイルにまとめられ、また組み込み関数を活用することで、計算のアルゴリズムも分かり易く示すことができる。本プログラムが、MD プログラムの基本的構造や、計算および解析の手法を学ぶ一助になることを期待する。

【MD プログラム】

プログラムの基本構造は、文献 [3] の FORTRAN 77 による例『単原子液体の分子動力学』を元としている。計算条件として、数密度 **numberDensity** (以下、このフォントで表された量は *Mathematica* 内で使用する変数名を示す)、初期温度あるいは設定温度 **temp**, 速度スケールによる温度制御をするか否かのフラグ **tconst**, MD ステップ数 **nstep**, MD 時間刻み **dt**, 粒子数に対応する **nfcc** などを設定し、Verlet 法に基づいて MD を進める。

初期配置は、4 粒子からなる fcc 単位格子を、三次元各方向に **nfcc** 個それぞれ積み重ね、全粒子の位置をランダムに歪ませて作成される。従って、MD セルに含まれる粒子数は $nsp = 4 \times nfcc^3$ となり、セルの大きさは **nsp** と **numberDensity** によって決まる。Figure 1 に、 $nsp = 256$ ($nfcc = 4$) の初期配置の例を示す。

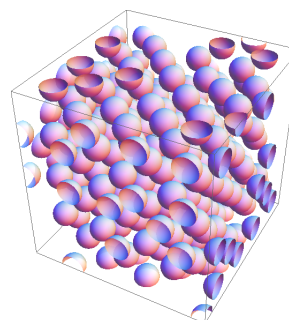


Figure 1. An example of the initial configuration at **numberDensity** = 0.6 and **nsp** = 256 (**nfcc** = 4).

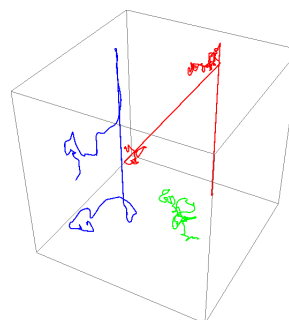


Figure 2. Trajectories of some particles at **numberDensity** = 0.6, **nfcc** = 4, **temp** = 1, **nstep** = 1000 and **dt** = 0.01.

【MD 計算例】

計算を実行すると、熱力学量のほかに粒子の軌跡、粒子配置、二体相関関数、速度自己相関関数、平均自乗変位および自己拡散係数が出力される。たとえば、粒子の軌跡図または粒子位置の時間発展グラフによって、セル外に出た粒子が周期境界条件によってセル内に戻される様子が確認できる。Figure 2 に、液体に相当する状態点における粒子の軌跡の例を示した。このほか詳細は、講演にて *Mathematica* ノートブックファイルを映示しながら示す。

参考文献

[1] Y. Kataoka and Y. Yamada, *J. Comput. Chem. Jpn.* **14**(1), 18-21 (2015).

[2] Y. Kataoka and Y. Yamada, *Bull. Res. Cent. Comp. Multimedia Stud. Hosei Univ.* **29**, 1-4 (2015).

[3] 片岡洋右『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).