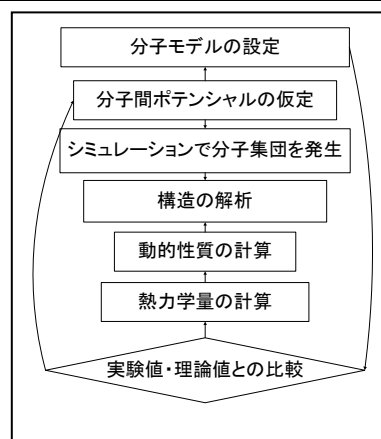


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-1. シミュレーション
小項目	3-1-2. 分子集合体

概要

溶液に代表される分子集合体の分子レベルの構造・分子間相互作用に基づく巨視的性質の理解・予測を目指して分子シミュレーションの方法が研究されている。これはポテンシャル関数と数値シミュレーションから熱力学量・輸送係数・散乱実験等で観測される意味でのミクロな構造など幅広く計算可能とする極めて強力な手段である。ポテンシャル関数の蓄積とより有効なアルゴリズムの開発でポピュラーな計算手段となると予想される。



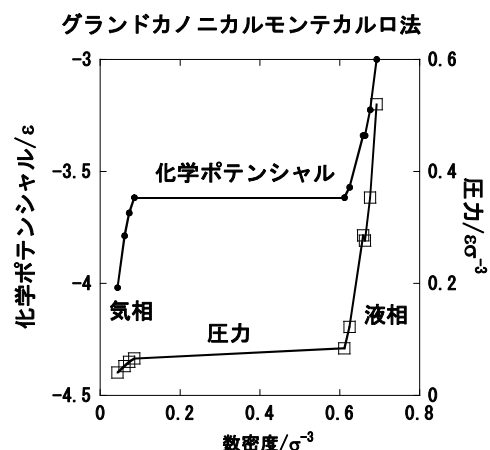
現状と最前線

最も幅広く行われている研究は古典統計力学に基づく平衡状態のシミュレーションである。モンテカルロ法と分子動力学法が主な方法である。分子自体についてのモデリングを行ったのち、分子間ポテンシャル関数を与えてシミュレーションにより分子集合系の多数のサンプルを得る。得られた多数の分子配置から構造上の特徴を求め実験と比較する。輸送係数や熱力学量も同様である。実験値と最低限定性的な一致が見られないときはモデルとポテンシャルの部分に立ち返ってモデルを作り直す。

この部分ではポテンシャル関数が実際の系を良く表しているかが計算結果の良否を決めている。たとえポテンシャル関数が既知としても多くの研究の蓄積にもかかわらず、たんぱく質の立体構造の予測のような複雑な構造については、いまだより有効な方法が精力的に追求されている。構造が本質的に極めて多数の極小エネルギー構造を持つ分子系の場合である。多数の方法の中でも拡張アンサンブルの方法が有力視されている。

希薄溶液などの場合、モンテカルロ法や分子動力学法のような分子シミュレーションのみでは計算能力が及ばない場合が多い。こうしたときは、3次元RISM理論との組み合わせが有効であることが実証されている。またエネルギー表示の理論との組み合わせも新しい方法として注目されている。

分子シミュレーションから巨視的性質を導く方法の中で、最も重要でありながら最も困難なのが化学ポテンシャルの計算である。計算量が多く手間がかかるが比較的安定的に計算が可能な方法の一つが各種の熱力学的積分法である。この方法を越える決定的な方法はまだない。化学ポテンシャルを指定したグランドカノニカルモンテカルロ法による気・液平衡についての計算例を図に示す。



D. Frenkel & B. Smit, "Understanding molecular simulation : from algorithms to applications", Academic Press (2002)

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題
ポテンシャル関数のデータベースの整備

より多様な分子系についての分子シミュレーションが実行されるようになる。分子シミュレーションの実行を阻む要因の一つが、適切な分子間ポテンシャルが未知であることである。有効ポテンシャルの開発は非経験的量子化学計算に基づく相互作用エネルギーの推算が徐々に広まりつつあるので、ポテンシャル関数についての情報は飛躍的に増えると予測される。ただこれのデータベース化などの課題を克服しないと、広く使用されるようにはならないという危惧がある。

各種ポテンシャルと各種アンサンブルに柔軟に対応する分子シミュレーションプログラムの整備

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

第一原理分子動力学法は一般ユーザが使いやすい形でプログラムが整備され、コンピュータの能力が飛躍的に向上すれば、電子状態が分子配置の影響を受けるような場合について広く実行されるようになると予測される。

アミノ酸配列が与えられたたんぱく質についてその水溶液における立体構造を物理化学的計算から導く

分子シミュレーションと粗視化モデリングとのリンク

キーワード

古典分子動力学シミュレーション
 化学ポテンシャル
 第一原理分子動力学法
 拡張アンサンブル

(執筆者： 片岡洋右)