

分子動力学の新展開考<sup>\*</sup>)

金沢大学理学部計算科学科 樋渡 保秋

(2001年2月14日受理)

昨年、物性研究編集部より、様々な意味で参考になりそうな数値計算の手法をわかりやすく紹介するシリーズ「物性研究者のための計算手法入門」に執筆の依頼がありました。中でも、特に「目新しい有用な MD 手法はないのか、また応用上に面白い話はないのか、例えば蛋白等はどうか」等の観点についての考察が編集部からの要望でした。分子シミュレーションの最近の進展は目覚ましく、(1) 高速、高精度に関する種々のアルゴリズム (2) 複雑な系の有効なサンプリング法 (3) 異なるサイズの系 (従って用いる計算式も異なる) 間のハイブリッド (量子系と古典系、古典系と古典系など) (4) 並列計算技法および巨大なシステムサイズへの適用例など、物性研究者も見逃せない話が多くあります。この内、マルチカノニカル分子動力学による拡張アンサンブル法については別稿で詳しくとりあげられているように、たんぱく分子の折り畳み過程 (機構) 解明などに積極的に用いられているものです。もちろん、この問題に限らず、他の多くの複雑過程の解明に今後普及していくであろうことは容易に推察されるところです。

分子 (動力学) シミュレーションを用い、複雑な現実の物質の物理化学的諸性質を解明する研究は、近年、特に進展が著しいように思われます。しかしながら、これ迄の経験では現代の高速コンピュータを用いても幾多の困難を伴うことも事実です。この為、計算上の種々の工夫が不可欠となる訳です。我々は、これらの新手法について、最新の研究成果が語り合えるような研究会、「分子動力学の新展開」を平成 12 年 11 月 16 日、17 日の両日 (山中温泉にて) 行いました。そのプログラムの概要は以下の通りです (敬称略)。

11月16日 (木)

・林 亮子 (北陸先端科学技術大学院大学)  
「並列 MD を用いたカーボンクラスターの計算」

<sup>\*</sup>) 本稿は、編集部の方から特にお願いして執筆していただいた記事である。

- ・志水 久 (信州大学)  
「マルチカノニカル MD の問題点」
- ・磯部雅晴 (JST 研究員)  
「マルチカノニカル MD によるモデル Protein-G 系の研究」
- ・川本周平、定浩希、仲谷光司 (金沢大学)  
「Symplectic Integrater による MD」
- ・古石 貴裕 (理化学研究所)  
「分子動力学専用計算機 MDM」
- ・三上益弘 (物質工学工業技術研究所)  
「分子シミュレーション手法の最近の発展と将来」

11 月 17 日 (金)

- ・岡本祐幸 (分子科学研究所)  
「拡張アンサンブル法による蛋白質のシミュレーション」
- ・相田美砂子 (広島大学)  
「QM/MM-vib 法に基づいた ab initio MD 法：水溶液中の化学反応への応用」
- ・高橋英明 (大阪大学)  
「ハイブリッド型第一原理分子動力学法による超臨界水中の反応のシミュレーション」
- ・質議応答

以 上

現在この報告集の作成作業にとりかかっているところです。本報告集を希望する人はメールにて [hiwatari@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp](mailto:hiwatari@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp) 迄ご連絡下さい。数に制限はありますが、可能な限り、実費で頒布いたします。