

分子動力学パッケージMASPHYC(Materials Explorer)

梅林, 泰宏
九州大学大学院理学研究院化学部門

竹内, 宗孝
富士通株式会社バイオIT事業開発本部

<https://doi.org/10.15017/1467682>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 6 (3), pp.166-166, 2007-03. Computing and Communications Center Kyushu University

バージョン :

権利関係 :

分子動力学パッケージ MASPHYC (Materials Explorer)

梅林 泰宏¹・竹内 宗孝²

概要

本学情報基盤センターのスーパーコンピュータ FUJITSU VPP5000/64 には、分子動力学シミュレーションパッケージである MASPHYC が実装されている。本稿では、分子小津力学シミュレーションと MASPHYC (およびその後継である Materials Explorer) について簡単に紹介したい。

[分子動力学シミュレーション]

計算機の高性能化や廉価化に伴い、各種の高度な計算化学手法が専門家でなくとも利用可能になりつつある。その最たる例は、*Gaussian* や GAMESS をはじめとする分子軌道法計算パッケージだろう。本学情報基盤センターでも *Gaussian03* が利用可能である。分子軌道法は主として気相孤立分子の電子状態を取り扱う。一方、物質科学の立場からは、気相孤立分子に興味があることはさほど多くなく、分子間力が重要となる液体や固体など凝縮相に興味の中心があることが多い。分子軌道法でこれらの凝縮相物質を取り扱うことは、現在でも容易とは言い難い。

分子動力学(MD)計算は、1950年代後半に Alder と Weinwright により提案された。(引力が働かない液体でさえ固体に相転移する Alder 転移が見出された) MD 計算はモンテカルロ法とともにシミュレーションに分類され、統計量としての分子・原子配置を得る。MD には、分子間ポテンシャルを解析的関数で与え、運動方程式をニュートン方程式にしたがって時々刻々と解く古典的 MD と電子状態を扱いながら各原子に働く力を計算する第1原理 MD に大別される。第1原理計算は膨大な計算機資源を必要とするため小規模系に限られ、大規模系を取り扱える古典的 MD は、物質科学の多くの場面において有用である。

[MASPHYC]

本学情報基盤センターの FUJITSU VPP5000/64 には、古典的 MD パッケージ MASPHYC が実装されている。MASPHYC は、国産初の MD パッケージとして三上益弘氏ら(富士通(株)・現産総研)により開発され、現在も Materials Explorer[®]として開発が進んでおり、PC(Windows)や並列計算機(Linux)で利用できる。分子研や名大、東工大の計算機センターでも利用でき、山形大や法政大では教育用に導入されている。最大の特徴は、(1)溶液や液晶から金属、セラミックス、半導体まで取り扱える物質の広さと(2)ユーザーフレンドリーな GUI を導入した使いやすさにあるだろう。また、シミュレーション結果(トラジェクトリ)から様々な物理量を計算することができるが、このポストプログラムが実装されていることを挙げることもできる。

本学センターでは、富士通(株)の協力を得て MASPHYC 講習会が定期的に行われている。2006年度は、本学総合理工学研究院の池田先生、高等教育推進センターの藤井先生に、研究での実践的適用事例を MD 初心者にもわかりやすくご紹介いただいた。講習会報告という意味も含め、本誌にてご紹介したい。

¹ 理学研究院 化学部門 yumescc@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

² 富士通(株) バイオ IT 事業開発本部