



文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発
 「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」
 量子・古典ハイブリッド計算プログラム CAMUS-FSIS ver2.0

Research and Development for Next-generation Information Technology of MEXT,
 "Revolutionary Simulation Software"
 Quantum mechanical/Molecular mechanical Hybrid simulation program CAMUS-FSIS ver2.0

東京大学生産技術研究所 ————— 計算科学技術連携研究センター

分類	ナノシミュレーション
キーワード	ハイブリッド計算
開発者	中村美道、宇田 毅、大野隆央
公開年月	2007年12月
コード名	CAMUS-FSIS ver2.0
使用言語	Fortran90

◇QM/MMハイブリッド計算

材料物性シミュレーションにおいては、量子力学 (QM) に立脚した計算により、精度良い結果を期待することができる。しかしながら、QM計算の実行は、系の規模が大きくなるにつれ、計算コストの点で難しくなっていく。反応中心から離れた領域は、反応には直接関与しないが、反応中心を取り巻く環境として役目があり、無視する訳にはいかない。このような領域は、古典力学 (MM) 計算でも十分な精度で記述できることに注目する。ハイブリッド法は、系を仮想的に領域分割し、計算コストと精度のバランスを考慮して、各領域に見合う計算手法を割り振り、大規模系の計算実行を可能にする手法である。

◇プログラムの概要

ハイブリッド計算プログラム CAMUS-FSIS ver2.0 は、従来の機能(A)に加え、(B)(C)を装備して、「フリーソフトウェア」として公開予定である。なお、CAMUS-FSIS ver2.0 のQM計算エンジンは第一原理計算プログラム PHASE であるが、PHASE の別途ダウンロードは必要ない (CAMUS-FSIS ver2.0 に組みこみ済み)。

(A) シリコン基盤系を想定した QM/MMハイブリッドシミュレーション

各種のリンク原子/分子法を基礎に、QM/MM領域をスムーズに接続する。QM領域を、FP (第一原理)/TB (強結合近似) 領域へ詳細分割することが可能。各領域の接続境界は、(100)、(111)面境界が設定可能。

(B) MM 力場モデル追加

MM 力場として、生体分子シミュレーションで用いられる AMBER 力場モデル[1]、および水分子の TIP3P 力場モデル[2]を追加。

(C) QM/MM 非結合相互作用

溶液系ハイブリッドシミュレーションを想定した QM/MM 間の非結合相互作用(静電相互作用、ファンデルワールス相互作用)を導入した。

◇計算例

QM/MM 間の静電相互作用計算のテスト例を図1に示す。MM 原子(灰色の球で表示)の部分電荷は(a) $-1e$ 、(b) $+1e$ (e は電子の電荷量の絶対値)である。QM 原子は水素原子である。MM 原子の電荷の符号に応じた QM 電子の振る舞いが正しく再現されている。

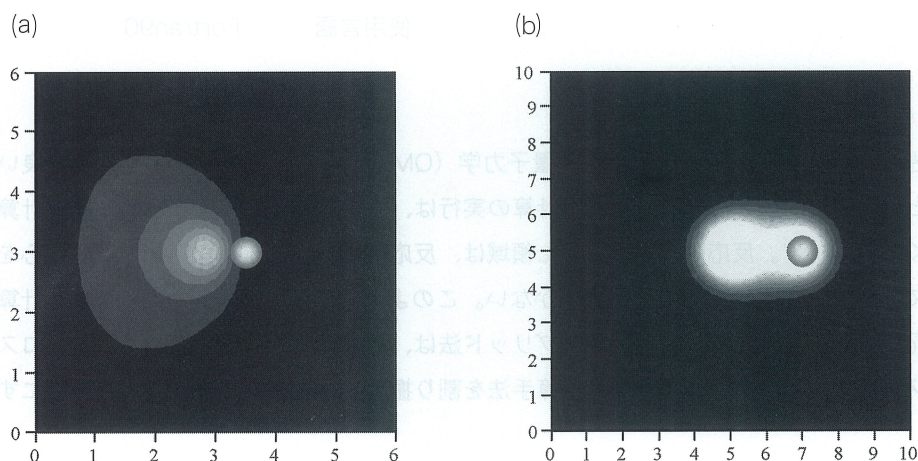


図1 MM 原子(灰色の球で表示)の静電場の影響を受けた QM 水素原子の電荷分布
(a) QM 水素原子と MM 原子(部分電荷 $-1e$) の間の距離 0.5 \AA
(b) QM 水素原子と MM 原子(部分電荷 $+1e$) の間の距離 2.0 \AA

◇関連論文

- [1] W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly, I.R. Gould, K.M. Merz, Jr., D.M. Ferguson, D.C. Spellmeyer, T. Fox, J.W. Caldwell, P.A. Kollman, J. Am. Chem. Soc. 117 (1995) p.5197.
[2] W.L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J.D. Madura, J. Chem. Phys. 79 (1983) p.926.