

分子動力学による 物質理工学の研究

中部大学大学院・客員教授 田中基彦
<https://physique.isc.chubu.ac.jp/>

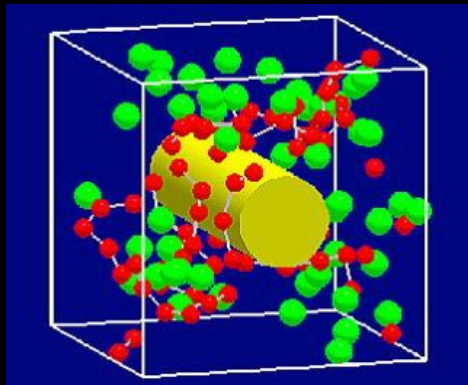
Photo: M. Tanaka

講演の内容

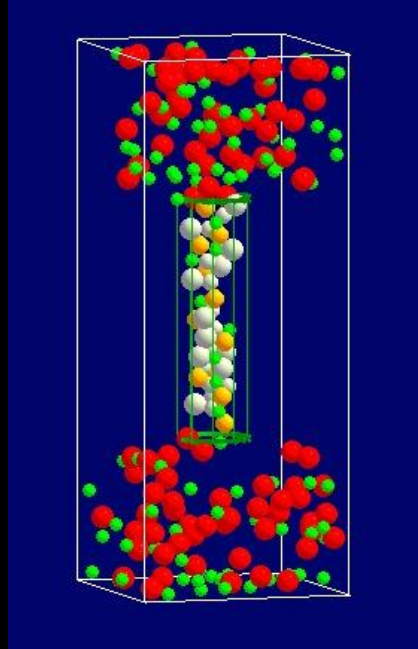
1. 計算機シミュレーションとは？
2. 研究手段としての高速計算機
3. 電磁場を伴う現象への
計算機シミュレーション法の応用

Plasma and Ionic Condensed Matters by Molecular Dynamics Simulations

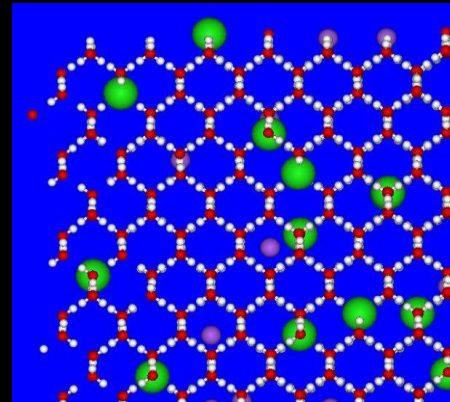
<https://physique.isc.chubu.ac.jp/>



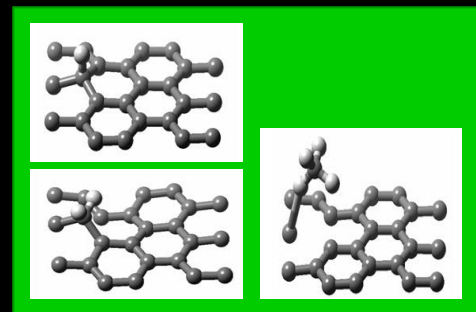
Charge inversion



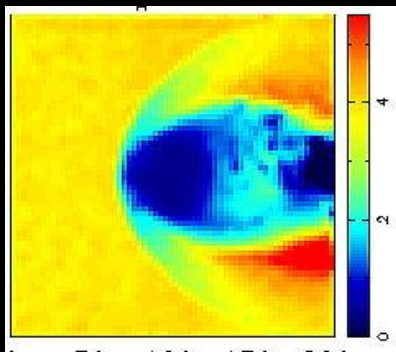
Nanopore with DNA
in membrane



Microwave heating
of water and ice



Graphene destruction
by hydrogen
adsorption



Planetary
shocks

Plasmas

First proof of Collisionless Magnetic
Reconnection

Ionic Condensed Matters

Clusters



Boewulf PC cluster

分子動力学による物質理工学の研究

参考文献

1. 「**高温プラズマの物理学**」(田中基彦・西川恭治、丸善、1996)
2. 「イオン性ソフトマターの分子動力学: 両極性高分子とマクロイオンの電荷逆転現象、**固体物理** 37, 207 (2002).
3. 「手軽に作れる研究室専用スーパーコンピュータ: 高速通信 ソフトウェアを利用したPCクラスター計算機」 **物理学会誌** 59, 898 (2004)
4. Microwave heating of water, ice and saline solution: Molecular dynamics study, **J.Chem.Phys.** 126, 034509 (2007).
5. Selective heating mechanism of magnetic metal oxides by a microwave magnetic field, **Phys.Rev. B.**, 79, 104420 (2009).
6. M. Tanaka and M. Murakami, Relativistic and electromagnetic molecular dynamics simulations for a carbon{gold nanotube accelerator, **Computer Phys. Commun.**, 241, 56 (2019).

URL <https://physique.isc.chubu.ac.jp/>

1. 計算機シミュレーションとは？

例：トンネルを掘る

ここに山を掘りたい

トンネル — 掘る？

迂回路はある？ -> ない

ではトンネルを...

長さ 400 m

地盤は大丈夫？ 地下水は？

方法 手堀り, ダイナマイト？

費用 手で搬出; ダンプで...

--> 掘る, 完成

このところを, よく考える!



北陸線 旧道(今庄)

計算機シミュレーション: 実験・理論に次ぐ第3の方法

物理学・工学の方程式をたて、

計算機を用いて、数値的に解いて調べる

主な方法:

1. 電磁場を加えて、発展(準定常)をみる

-> 現象のメカニズムを知る

2. ことなる定常状態に行き、様子を調べる

-> 予測や設計に役立つ

➡ 「つじつま」が合い、説明がつくこと !

数値シミュレーションでは

- 空間・時間スケールにより、「手法」を使い分ける
- 手法に応じて、「計算機」が異なる

ユニバーサルな手法は 無い

例) すべての効果を含む <-> 計算は限られる
Schroedinger 方程式

対象:

高温プラズマ

手法:

磁気流体力学

粒子シミュレーション

m-10⁴ km

μm- cm

精度が
高くなる

液体・高分子

分子動力学

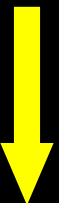
nm - μm

原子が見える

固体・結晶

第一原理 分子動力学

Angstrom - nm



結果の表示

○ 数値データ

電子ファイルに格納 (見ることはまれ)

○ グラフにより可視化

物理・工学量の関数として, 表示する (普通)

○ アニメーションをみる

動きを通して, 直観的に理解ができる

ただし, メカニズムがわかるように – 遊びでない!

例) 荷電粒子のクーロン爆発

方法: ニュートン力学で, 静電相互作用を調べる

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \nabla \left\{ \sum_j \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + 4\epsilon_{LJ} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \right\}, \quad \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

力

静電的な力

分子間の
短距離力

座標

設定:

開放系で 無限大

熱い電子 + 冷たい H(+) のペレット + 重いイオン Be(+4)

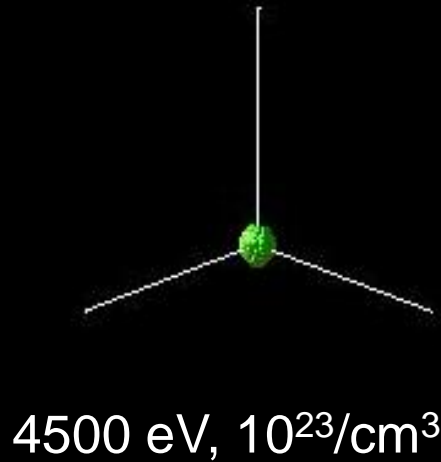
時間スケール: フェムト秒 (10^{-15} sec)

アニメーション

QT-hevi257.mov はやい

QT-hevi256.mov おそい

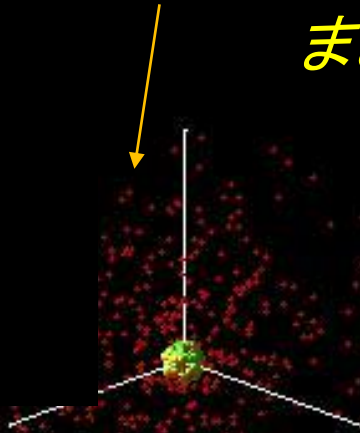
初期状態



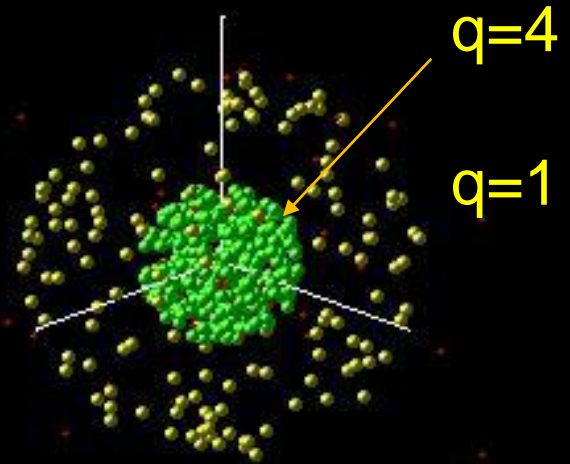
電子 4200, $q = -1$
不純物イオン 150, $q = 4$
プロトン 3600, $q = 1$

電子 赤

-> 飛び散る 4500eV, or
まとわりつく 4.5eV



終状態



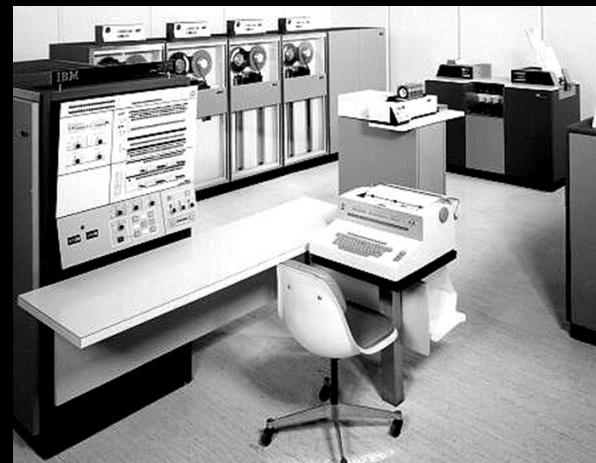
軽いイオン (外側)
と重いイオン

2. 並列計算機の利用

コンピュータの発展

1960's 汎用コンピュータ (*mainframe*)
IBM System/360

ソフトウェアを挿し替え, マルチタスク,
仮想記憶, HDD, オンラインのシステム



1970's 理工学用の高速計算機
0.1234567e-77 浮動小数点

8 bits=1 byte, 32 bits=1 word
を確立した!

流れ作業(ベクトル型)を得意

Simple instructionで構成して,
データだけがことなる



$+ - * / \sqrt{\quad}$ vector, matrix, IF...



レジスタメモリのCray-1

なぜ高速計算機？

単体の計算機 – おそい

PC: ◎安価 △信頼性 (メモリのエラーあり<-ため)

サーバー: ◎信頼性 △値段が高い

(パリティエラーを回避する)

●並列(クラスター)の計算機を使うと, ...

高速性 CPUが力を合わせ, かつ通信が速い

<- N倍はやい!

信頼性 1週間~1か月の連続計算に耐える

低消費電力 eco(環境・費用) <- 空調の軽減

並列計算機： データと管理用の2重ネットワーク

NICカードに、IPアドレスが割り当てられる

Cluster Machine

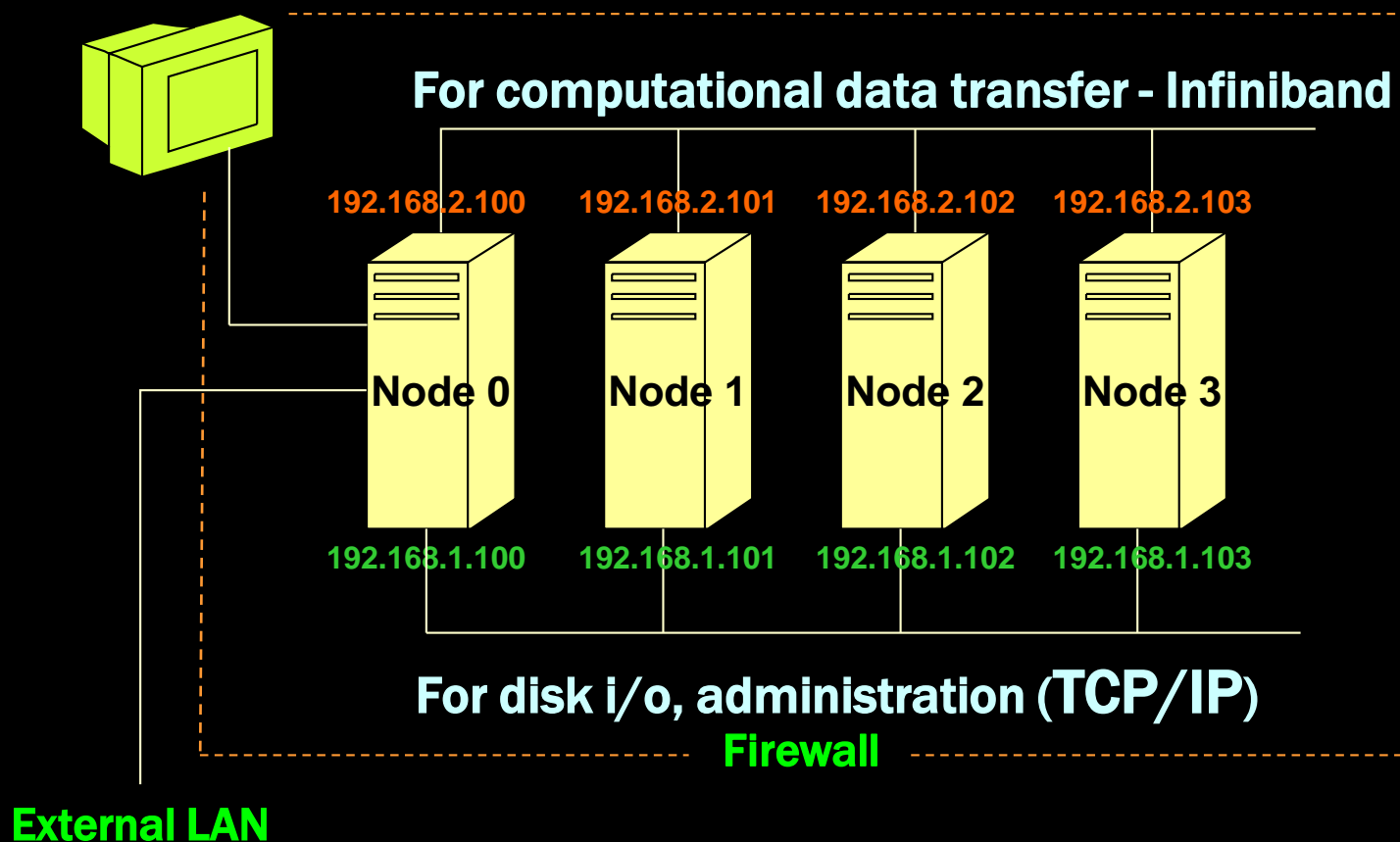


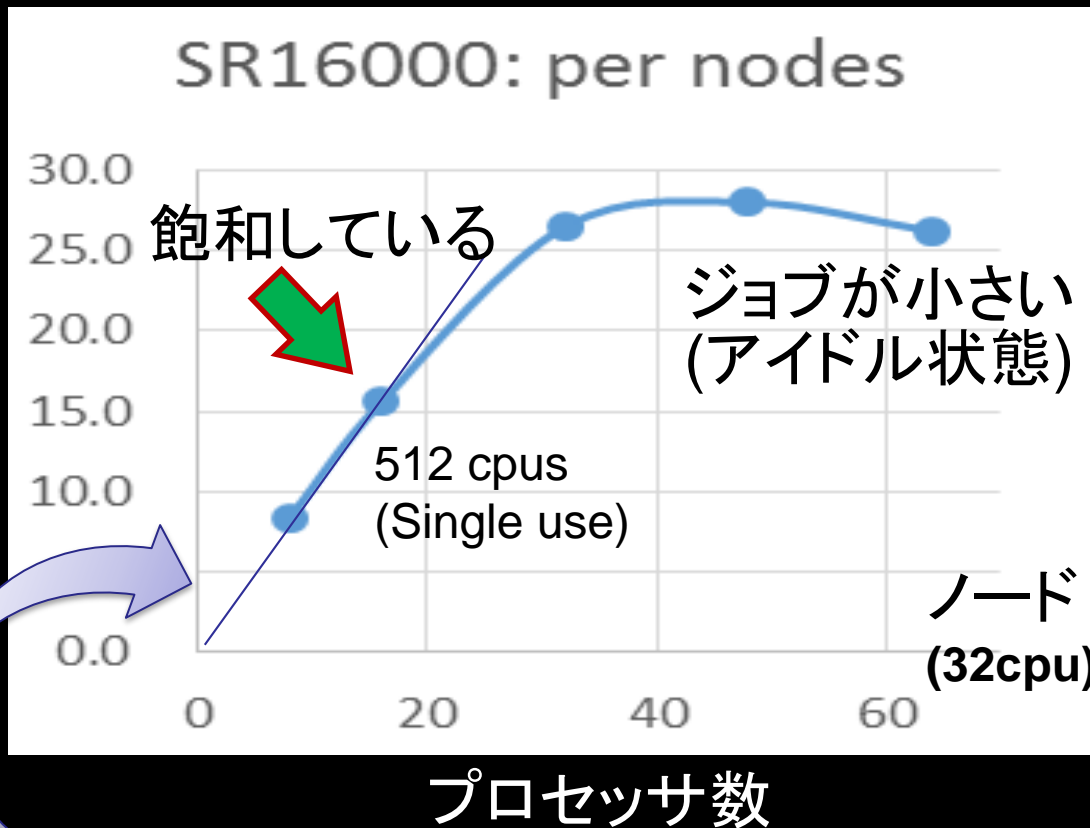
Fig.1 M.Tanaka

日本物理学会誌, vol.59, pp.898-902 (2004)

計算時間: CPU数で速くなる

使用CPU = $32(\text{cpus}) * \text{nodes}$; SR by Hitachi (2015)

計算速度 (向上率)



線形増大の飽和点は
ジョブの性格による
(512 cpusのとき)

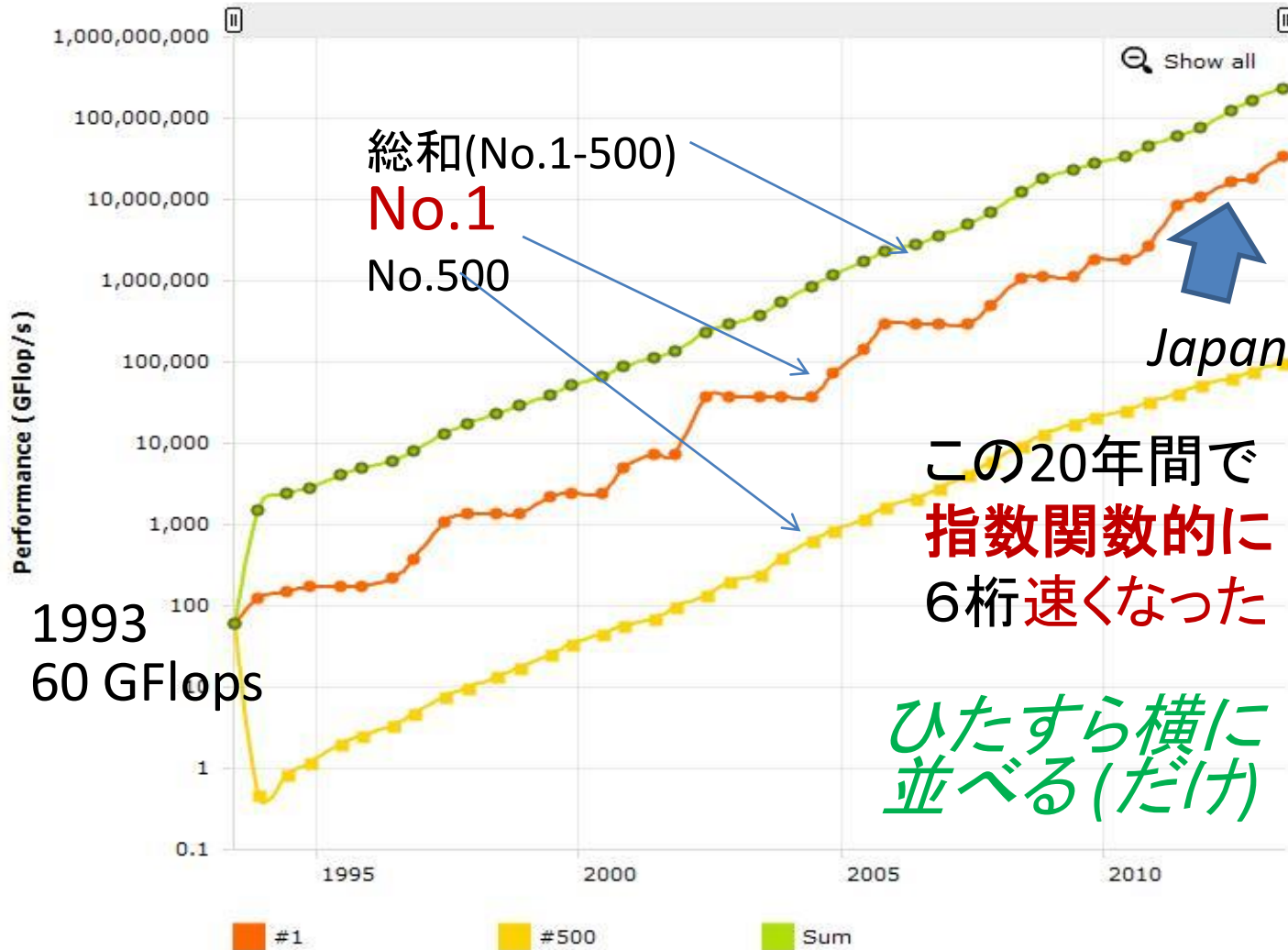
(あるcpuまで) プロセッサとともに, 速くなる

Best: 500,000 粒子/512 cpus = 1,000 粒子/cpu

World Top 500 Computers

<http://www.top500.org/>

2013 top
34 Peta
Flops



1京 =
10,000,000,
000,000,
000 = 10^{16}

3. 電磁場を伴う現象への 計算機シミュレーション法

高温プラズマ

強結合系分子系

量子力学の分子動力学

-- 遠赤外波による水の加熱

クーロン力のN体間・相互作用

-- クーロン爆発による加速

計算機シミュレーションの面白さ

— および 難しさ

実行(計算)してみないと、わからないことが
目の前で起きる！

○ **非線形**現象は、**予想外の**ことが起きる！
(線形現象は 解析的に予想がつくが、...)

○ **結果の説明**をつける！
(数値的なエラーの可能性をまず疑う)

高温プラズマ vs 強結合 分子系

高温プラズマ ↔

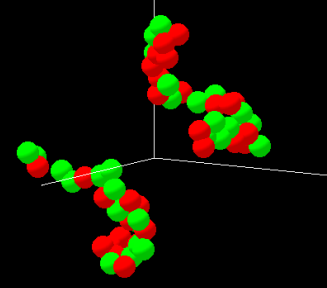
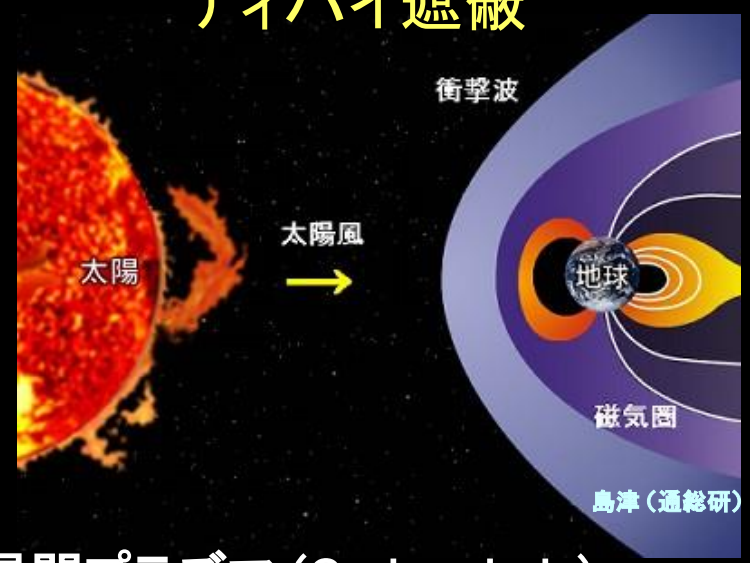
強結合系 分子系

熱エネルギー
>> 静電エネルギー

静電エネルギー
> 熱エネルギー

ディバイ遮蔽

近接の相互作用



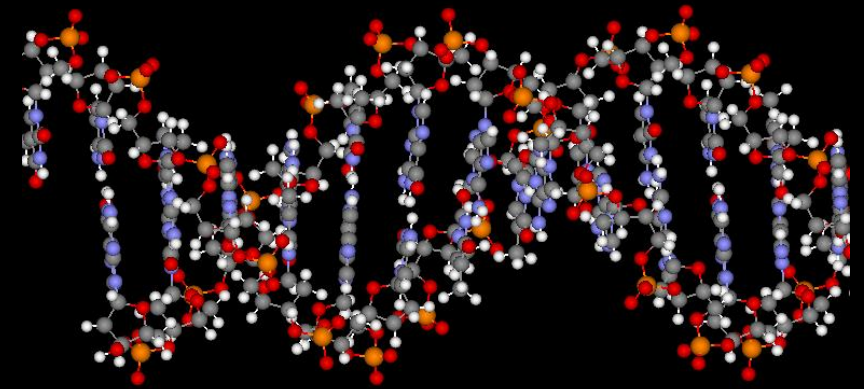
Poly-ampholyte

荷電高分子
DNA、たんぱく質
生体細胞
コロイド
イオン液体

液体

星間プラズマ (Crab nebula)
太陽風プラズマ, 惑星磁気圏
雷、グロー放電
実験室・核融合プラズマ

希薄流体



Double-stranded DNA

強結合分子系

近接相互作用が本質的

Strong Coulomb Interactions

Coulomb coupling constant ← Physics (Theory)

$\Gamma = \text{electrostatic energy } e^2/\epsilon a$
/ thermal energy $kT > 1$

$$\Gamma = e^2 / \epsilon a k_B T$$

Γ が大きい

Alternatively,

Bjerrum length

これより内側で
静電力がまさる

← Chemical physics

length at which Coulomb energy (closer)
equals thermal energy (more distant)

$$\lambda_B = e^2 / \epsilon k_B T \sim 7 \text{ \AA}$$

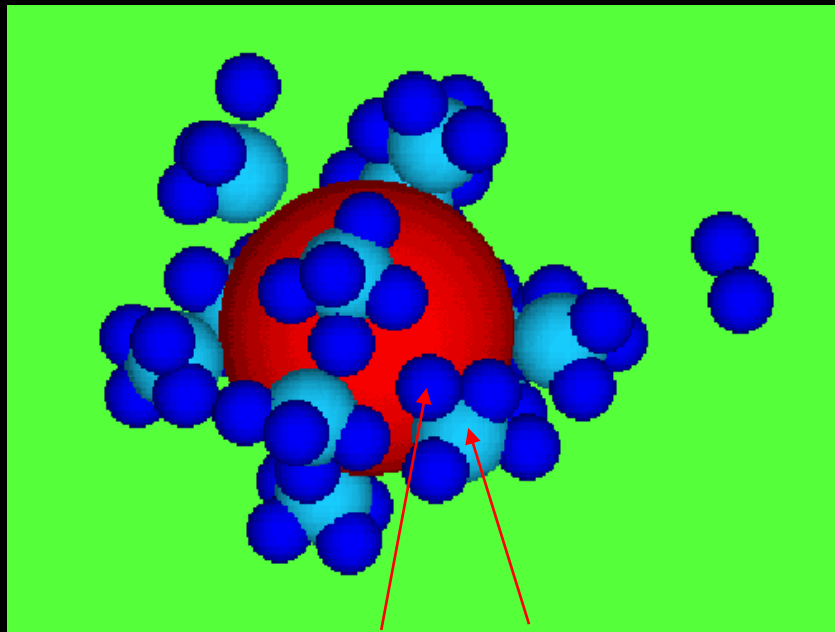
(water at room-temperature)

近接力が大きい

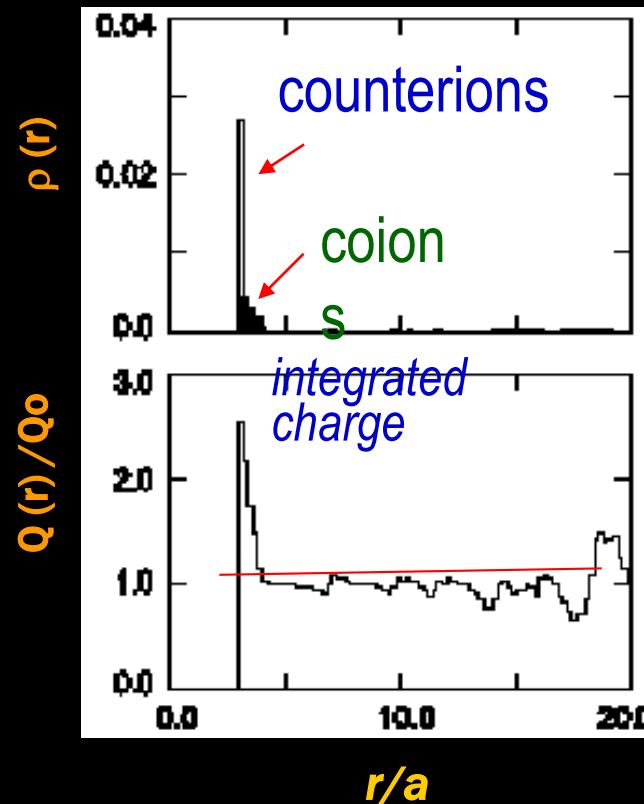
Charge Inversion: 逆符号に帯電する現象

イオン間の強い静電相互作用により、
マクロイオンとその周囲イオンが、「逆符号」に帯電
- 生体の現象で起きる！

Ions in the vicinity of a macroion



Coions (-) Counterions (+)



わずか
数Angstrom
で+, -
に反転する

↑
charge
inverted

Tanaka and Grosberg (J.Chem.Phys. 2001)

$Q_{\text{peak}}/Q_0 \sim 160\%$
in a static observable

DNA through nano-pores ナノ穴を通り抜けるDNA

First proof: the vital role of electrostatic effects in biophysics (Rabin and Tanaka, PRL 2005)

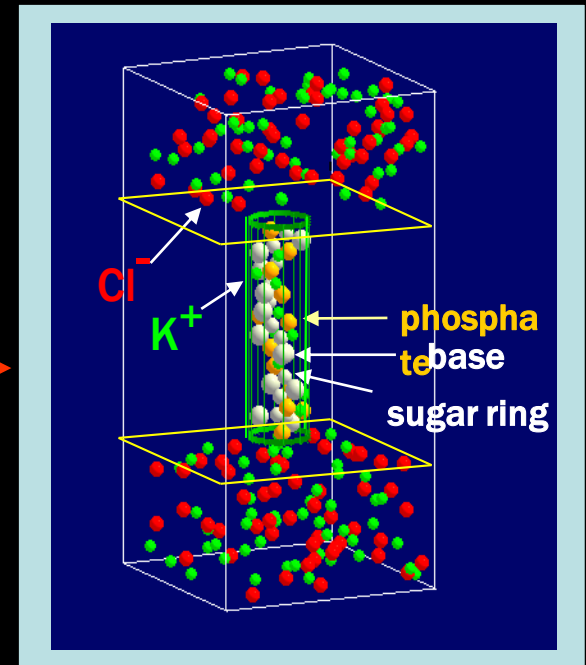
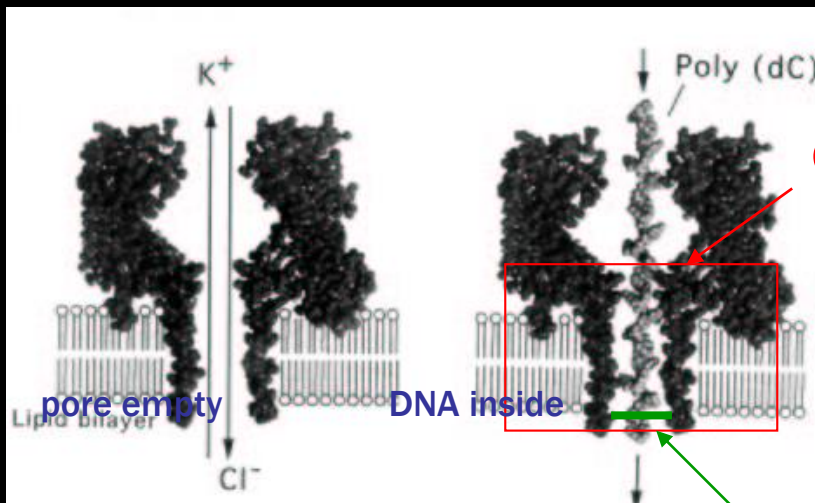
- the field is enhanced by a membrane of small dielectric constant; Salt ions are paired; DNA is neutralized, coions are depleted by electro-static repulsion

- α - hemolysin pore in lipid bilayers
- polynucleotide translocatable
- rapid DNA sequence reader

狭い
ところ
を好んで
移動する

Our study →

15 Ang



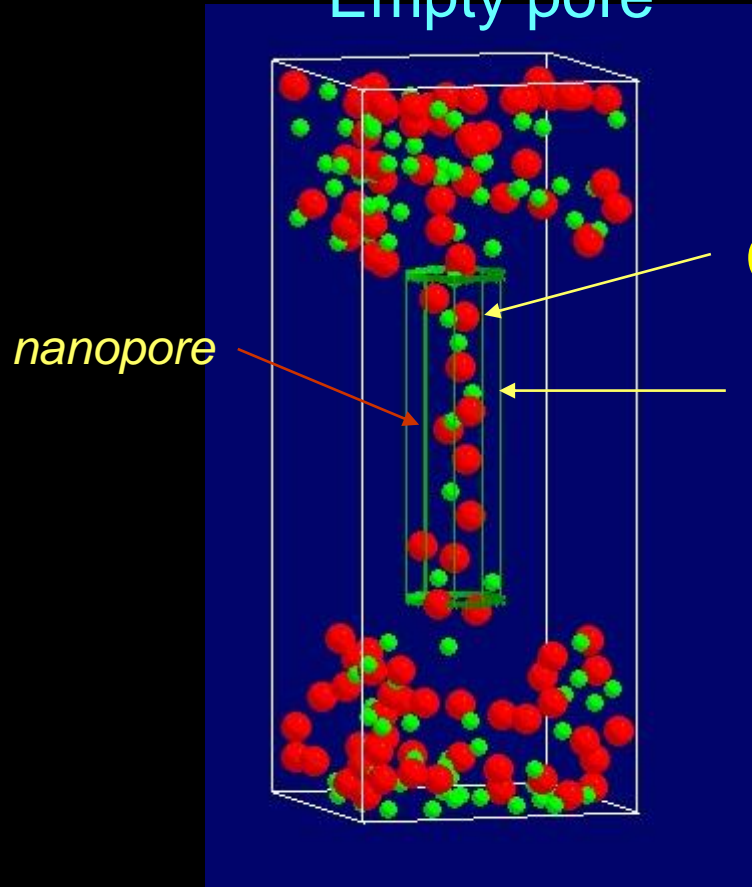
Deamer & Branton (2001)

1.5nm

Rabin and Tanaka
(Phys.Rev.Lett. 2005)

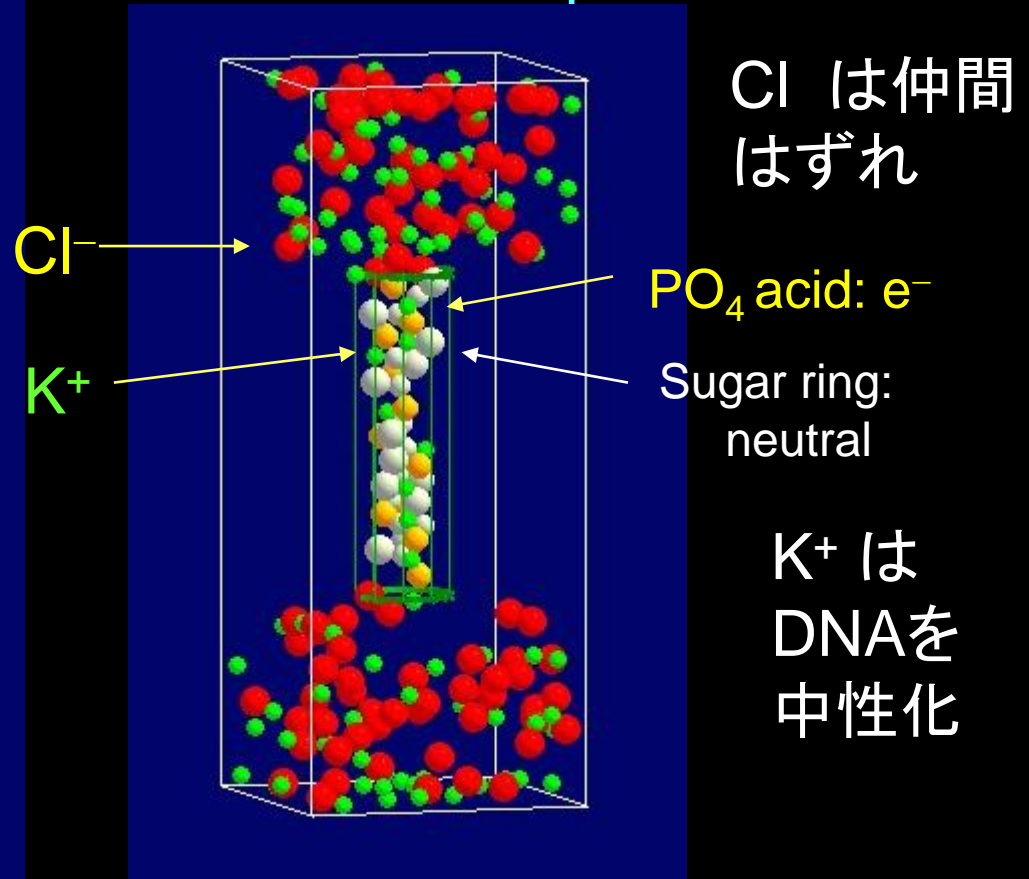
Behavior of Salt ions

Empty pore



Positive and negative ions
make a pair and pass through
the pore **+-イオンかペア
をつくり, 通過する**

DNA-stuffed pore



Cl⁻ は仲間はずれ
PO₄ acid: e⁻
Sugar ring: neutral
K⁺ は DNAを中性化
K⁺ ions neutralize DNA thru. the pore
Cl⁻ ions are excluded from the pore

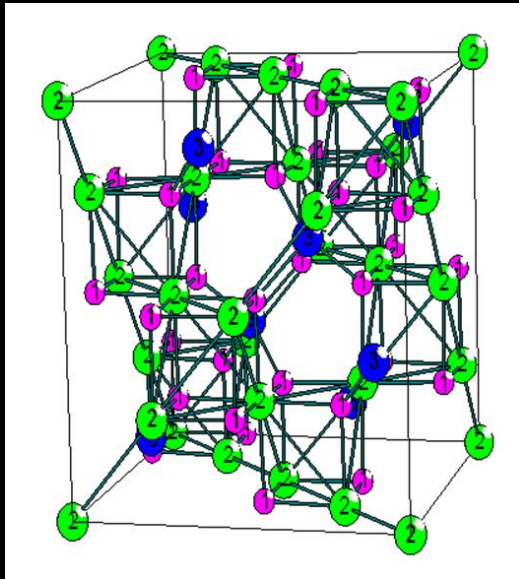
固体の物理学

マイクロ波による磁鉄鉱の加熱

磁鉄鉱は、なぜ $T_c=858K$ を超えて加熱される？

鉄工業で、マイクロ波でよく加熱される。

鉄屋は常識 — なぜ？



Magnetic energy: spin 3d orbital

$$U = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + \sum_i g \mu_B \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}$$

強い磁性 $\text{Fe}_3\text{O}_4 = \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{FeO}$

Fe_3O_4 は、マイクロ波磁場で
スピンを介して加熱される

Tanaka, Kono, and Maruyama

Physical Review B 79, 104420 (2009)

マイクロ波による 水・氷・食塩水の加熱

水と氷は, どう加熱は 違うのか？

1. *J.Chem.Phys. J. Chem. Physics*, 126, 034509 (2007).
2. <https://github.com/Mtanaka77/>, ArXiv 2311.01182 (2024),

水とは... 不思議なもの !

H₂O の水・氷

電気双極子をもっている H-O-H への角105°
ランダムではない!

水素結合で, とんりの分子に H - O

分離は, おなじ 1.0 Ang. (10^{-8} cm)

かご (6-membered ring) が無限につらなる

x, y, z 方向へ

不思議な物性

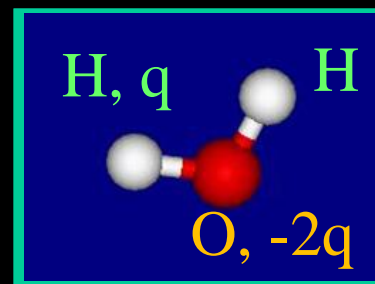
- 10個の基本形

氷が水に浮く! (+4 C max) 大きな誘電率, ...

シミュレーションの方法

* 3-Points H-O-H による水模型 約3.1 Ang.の径

* 約2,700個の $\text{H}_2\text{O} = (14)^3 \text{H}_2\text{O}$
対応する長さ (約 42 Ang)³
(正確に, 1.0 g/ccに)



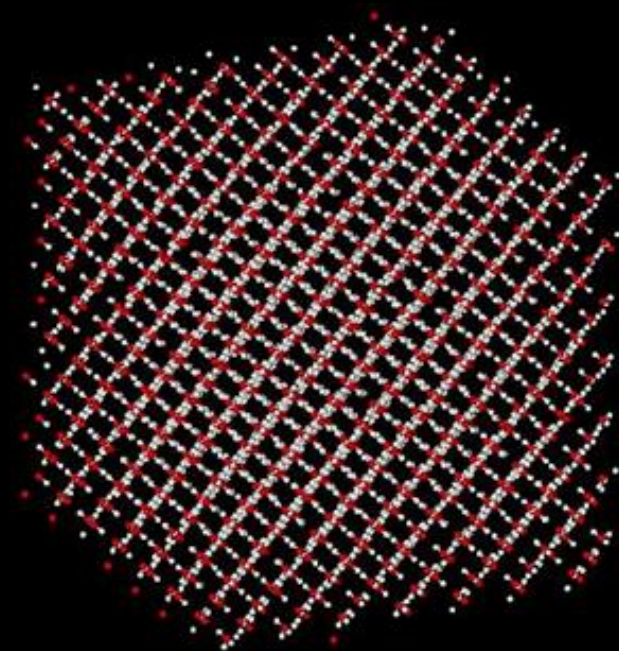
電子レンジ

* 2.5GHzで, 電場を連続にかける

$$E_x = E_0 \sin \omega t$$

これで, 系の発展を調べる

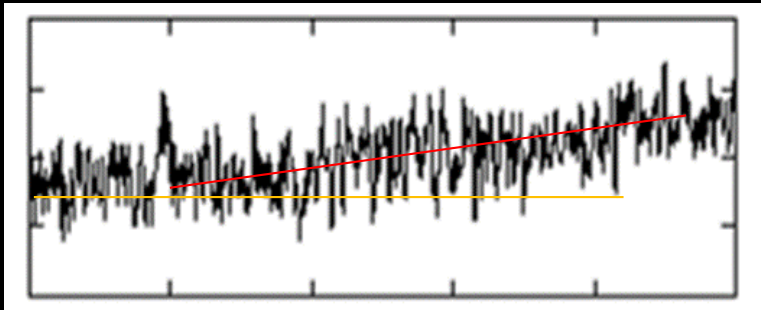
周期的な境界 $(0, L_x)$ 折り返し



- 水分子のラン: **双極子がうごく** <- 2,700個, 3次元
 電場 -> 双極子
 で平均する

$$E = E_0 \sin \omega t, \quad P = P_0 \sin(\omega t - \delta)$$

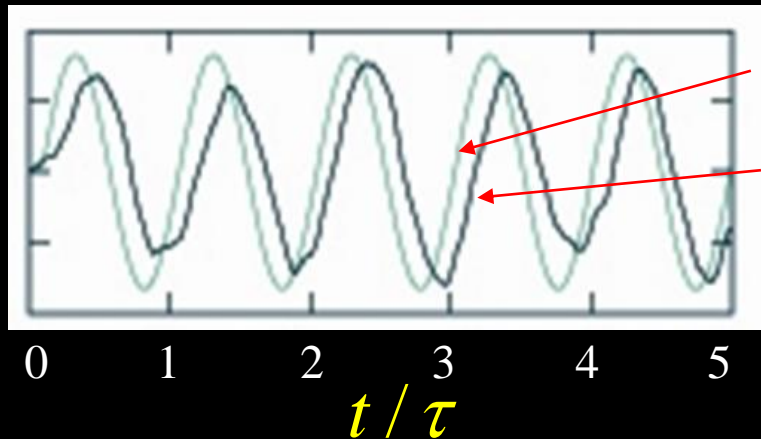
$\frac{dT}{dt}$



時間とともに
 エネルギーは増加していく
 ($t > \tau$)

π

$-\pi$



電場

双極子 (2700個を平均)

➡ **双極子は, 電場より
 位相が遅れている**

-- 4 cpu parallel (Pentium 3GHz)

● 双極子が均一な運動

電場 \rightarrow 双極子

$$E = E_0 \sin \omega t, \quad P = P_0 \sin(\omega t - \delta)$$

$$\frac{dW}{dt} = \left\langle E \cdot \frac{dP}{dt} \right\rangle \quad \text{時間で平均する}$$

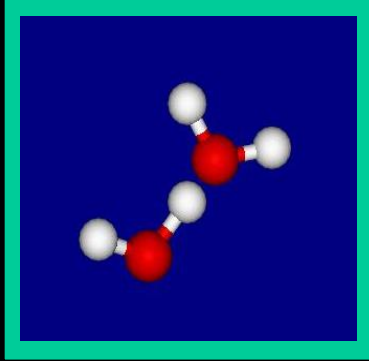
$$= E_0 P_0 \omega \langle \sin \omega t \cos(\omega t - \delta) \rangle$$

$$= E_0 P_0 \omega \langle \sin \omega t (\cancel{\cos \omega t} \cos \delta + \sin \omega t \sin \delta) \rangle$$

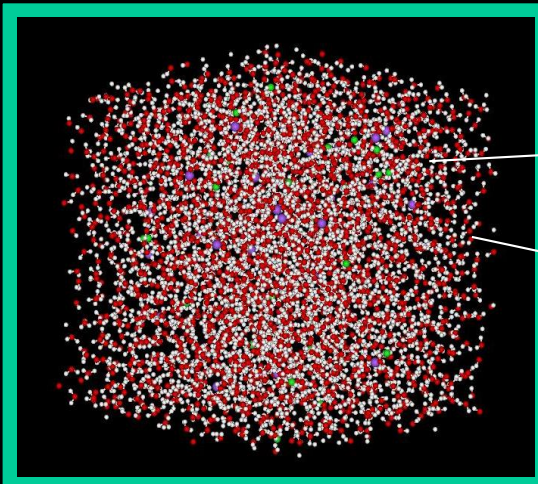
$$= \frac{1}{2} E_0 P_0 \omega \sin \delta > 0 \quad \text{加速!}$$

$$\delta / \omega \approx \tau_R = 4\pi a^3 \eta / kT \sim 0.1$$

Microwave heating of water and ice



Waters with
hydrogen bond H--O



Why and how is water heated ?

- (1) Liquid water is heated by **delayed rotation of electric dipoles** with regard to the microwave electric field.
- (2) Ice (crystal) is not heated because **the dipoles are at rest in hydrogen-bond network** (freezing).
- (3) Salt water (of 1% mol) increases the heating, not only of **water, but also salt ions.**

遠赤外電磁波による水の加熱

マイクロ波 2GHz 波長15cm

分子回転、 H_2O 分子どうしの相互作用

-> ニュートン力学の古典MD

遠赤外電磁波 5THz 波長0.06mm <- H_2O バンド

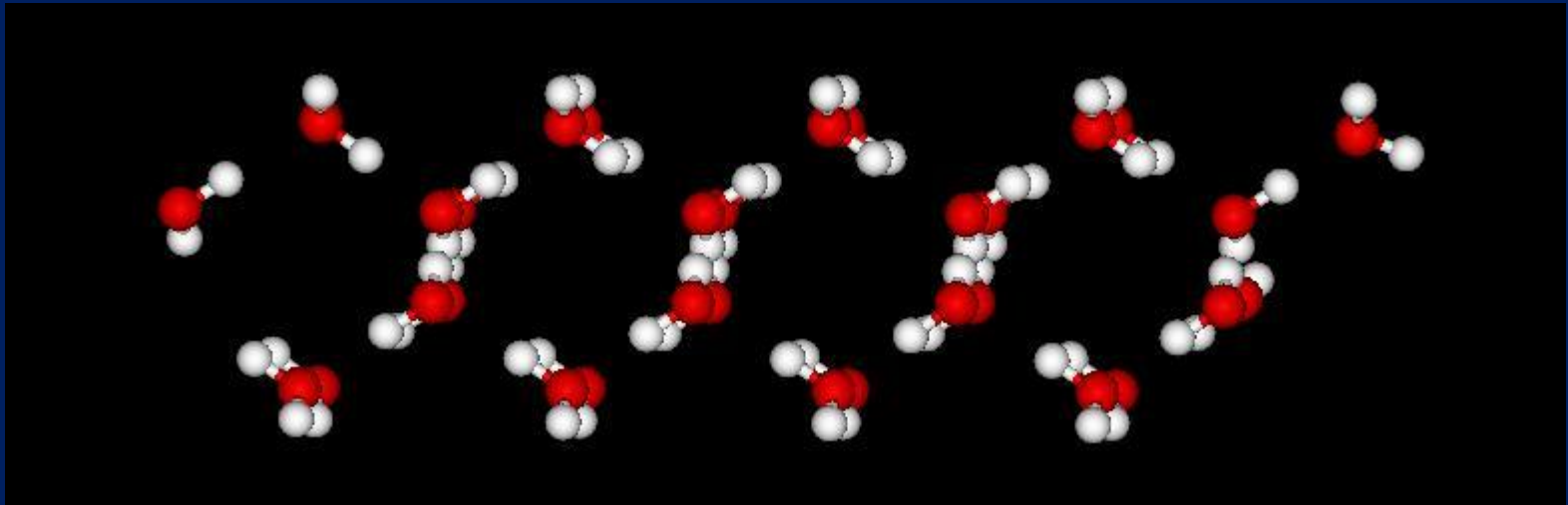
分子内振動

電子分極

分子運動

-> 機構を知る: 量子力学のMD を使う

アニメーション *iceA822*



室温の水:

波動 → 分子内の 原子振動 → 並進・回転へ緩和

0Kの氷:

波動 → 電子応答 → 分極 → 並進・回転へ

最近の研究から

クーロン力による加速過程
(静電気)

2013~

Summary

1. 計算機シミュレーション法は、階層性をもつ。
現象に応じて、手法の使い分けが必要
2. 非線形現象の研究は、計算機シミュレーション
が得意とする分野
3. 並列(クラスター)計算機の利用で、大規模な
物理化学系の研究に挑戦できる

しかし、「大きな計算機 -> 優れた研究」にするため
優れたアイデア ... と、努力... が大切である！