

まえがき

私たち6班は「物質創造支援シミュレータ」を計画する。「物質創造支援シミュレータ」は原子、分子のさまざまな状況におけるつながり方をシミュレーションする。そして、新たな物質を創造することを目的とする。

シミュレーションとは

コンピュータなどを使用して模擬的に実験を行うことである。実験内容を数式模型によって組み立て、これをコンピューター処理することによって実際の場合と同じ結果を得ようとする。

コンピュータシミュレーションとは、コンピュータケミストリー(コンピュータを用いる化学)の一分野である。

なぜシミュレータをつくるのか

新たな物質を創造するとき(実験)には、多くのリスクがある。このリスクを解消するためにシミュレータは必要である。

表1.試験的実験の欠点

試験的実験の欠点
危険物質の取り扱い
有害物質の発生の危険
過酷条件下での実験
貴重な物質の浪費

実験をコンピュータ上でシミュレーションすることで、リスクを減らし、かつコストも減らすことが可能。また、超並列コンピュータなど、コンピュータの進歩によってこの技術が可能になる。次の表に、スーパーコンピュータの種類をまとめる。

現在世界1位の演算能力を持つスーパーコンピュータは「地球シミュレータ」である。地球シミュレータはスーパーコンピュータ640台を8台ずつのノードに分割し、それぞれを高速ネットワークで接続し、総プロセッサ数は5120個、主記憶容量は10テラバイトである。

表2.スーパーコンピュータの種類

コンピュータの種類	説明
超並列コンピュータ	<p>パソコン・ワークステーション用として広く普及している安価なマイクロプロセッサを複数使って並列処理することによって高速化を図ったコンピュータ。専用の高性能なプロセッサを用いる従来のスーパーコンピュータよりコストパフォーマンスが高く、高速化しやすいのが特長。</p>
スカラ型コンピュータ	<p>一般的な構造のマイクロプロセッサを大量に搭載したスーパーコンピュータ。</p> <p>スカラ型スーパーコンピュータに搭載されているプロセッサは、サーバ・ワークステーション用のマイクロプロセッサを流用できる。このため、スカラ型スーパーコンピュータは専用のプロセッサを開発する必要があるベクトル型とくらべて汎用性が高く、コストパフォーマンスに優れる。</p> <p>プロセッサ単体での性能はベクトル型プロセッサの方が優れるが、プロセッサの並列接続が容易になるにつれて、コストパフォーマンスが高いスカラ型の構成でも、ベクトル型の構成に匹敵する速度での演算が可能になった。現在は、スカラ型スーパーコンピュータがスーパーコンピュータの主流となっている。</p>
ベクトル型コンピュータ	<p>ベクトル型プロセッサを搭載し、大量の配列処理を得意とするスーパーコンピュータ。</p> <p>ベクトル型プロセッサは大量のメインメモリを搭載しており、RAIDでいうストライピングのような形でアクセスを行なうことにより、大規模なデータを流れ作業的に処理することができる。この際、処理を行うデータの範囲などをあらかじめプロセッサに与えておくことで、読み込み・計算・書き込みを非常に効率よく処理している。</p> <p>ベクトル型スーパーコンピュータは、似たような計算を非常に多くのデータに対して行なう、気象予測や流体計算などを得意とする。現在世界最速のコンピュータである「地球シミュレータ」もベクトル型スーパーコンピュータである。</p> <p>ベクトル型スーパーコンピュータを初めて制作したのはCray Research社で、その後数社がベクトル型市場に参入していたが、現在では多くの企業がスカラ型市場に移行している。現在でも商業ベースでベクトル型スーパーコンピュータを生産している企業としてはNECが有名。</p>

コンピュータシミュレーションと他分野とのつながり

今回のコンピュータシミュレーションの対象は分子、原子である。これらは分子集団系とみることができる。そのため全体的に統計力学に基礎をおいている。計算がよりどころとしている運動方程式は古典力学、解析力学に基づいている。力やエネルギーの計算に必要な分子間相互作用は、統計力学、量子化学を出発点として見積もっている。そして、運動方程式である連立微分方程式の数値解を得るときには、数値計算法と呼ばれる実学的分野の成果をそのまま利用している。もちろん実際の計算

プログラムの作成にあたっては、コンピュータに関する多くのことも知らなければならない。単にFORTRANやC言語の文法に限らず、ベクトル化や並列化に関する現場の技術も必要である。

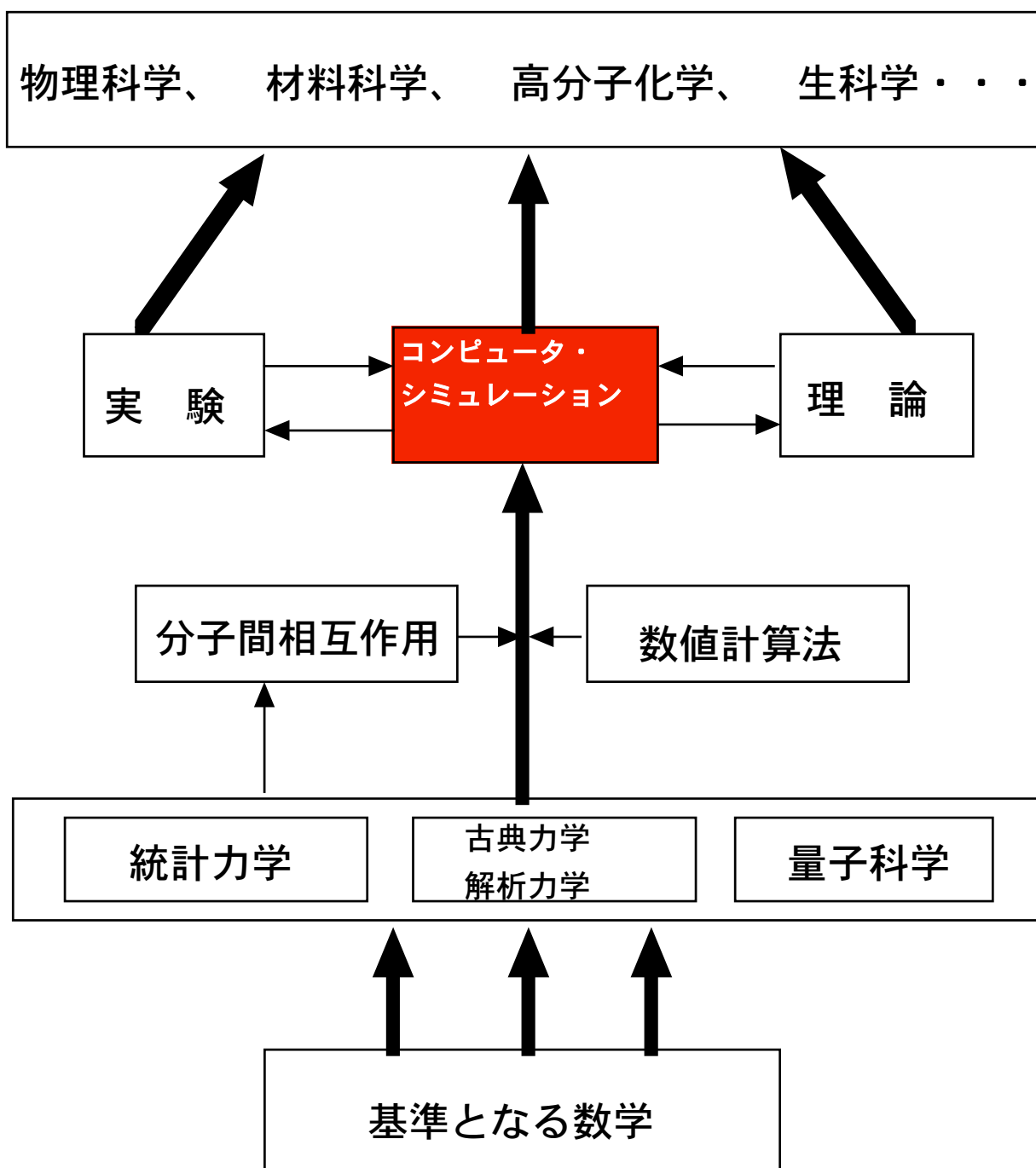


図1.コンピュータ・シミュレーションの他分野とのかかわり

コンピュータケミストリーの一分野

- 1.分子軌道(Molecular Orbital)計算
- 2.コンピュータシミュレーション(予見、予測)
- 3.データベース

応用

- 1.材料設計->分子やイオンの集合体である材料の機能がどのように発言するかを分子レベルから明らかにするで、積極的な制御->液晶、高分子
- 2.薬物設計->バクテリアなどの生命体の生体分子間に働く相互作用ポテンシャルを計算し、これら分子集団系に対して運動方程式を、ある時間にわたって正確に解くことができれば生命現象を記述できる
- 3.機能設計
- 4.一般的な物理や化学の教育

---説明---

1.MO計算

- ・電子にまつわる分子の性質の詳細な研究(物理化学)
- ・物質合成のための反応経路を組み立てる(有機化学)

2.コンピュータシミュレーション

- ・分子間相互作用から出発して、液体、個体、ガラスや超臨界流体、さらにはタンパク質や生体膜といった分子集団の、集団としての性質を明らかにしようというもの

3.データベース

- ・物質に関連する膨大な量の物理的、化学的性質をコンピュータのなかに集積し、そのなかから必要なデータを即座にとりだすことができるようにしたもの

分子集団系の微視的な性質を取り扱う方法

-->コンピュータシミュレーションの方法

- 2.1 分子動力学(Molecular Dynamics)法
- 2.2 モンテカルロ(Monte Carlo)法
- 2.3 分子力学(Molecular Mechanics)法

---説明---

- 2.1->分子集団系の運動方程式を構成分子のすべての対にたいして1つ1つ逐一解いて、それぞれの分子の軌跡を求める方法
- 2.2->統計力学の分配関数の計算を配置空間で数値的に実行する方法
- 2.3->ポテンシャル関数を用いて、複雑な化学物の存在の可能性やその安定構造について予見しようというもの

ここで問題としている物質の性質

個体や液体、気体といった**分子集団系の性質**

問題！

取り扱おうとしている系全体の自由度の数だけの運動方程式を解析的に解くことができない！よって、数値的に解いていくことになる。

また、運動方程式に働く力の評価が十分な精度で正しいものであり、かつ運動方程式に関しても十分に精度の高い数値解が得られるとすれば、系の全自由度に対して得られた分子の軌跡は、自然界で観察されるものと同等であると考えられます。

コンピュータで取り扱える原子や分子の数

実験で取り扱っている 10^{23} 個の分子について計算を行うことは、現実問題として不可能です。現在の最新鋭のコンピュータの性能をもってしても、取り扱うことのできる粒子数は、多くても $10^4 \sim 10^6$ 程度です。

したがって、限られた計算量でどのように分子集団の性質を取り扱っていくのかという問題が浮上します。

この重要な問題に対しては、周期境界条件と呼ばれる近似手法が広く用いられています。

少数の分子集団系と巨視系との最も大きな相違点に着目します。それは、表面効果です。

*表面効果：例えば、容器中の液体が容器の壁と接している海面を考えてみる。すると、この界面近傍での分子の振る舞いは、構造、動的な振る舞いともに液体内部の分子の振る舞いと明らかに異なる。これは系が $10^2 \sim 10^4$ 個の小さな系において顕著に起こる。

MD計算の長所と短所

測定器がいかに発達してきたとはいえ、分子集団中における特定の分子や原子1つ1つの位置を運動を $1/100\text{\AA}$ と 1fs の分解能で測定できる装置は存在しない。MD計算法によるコンピュータシミュレーションはこれができる実験装置です。

しかしながら、これらの長所がMD計算の大きな欠点の裏返しでもあります。すなわち、MD計算法においては巨大でゆっくりとした運動を示す系を取り扱うことはできないのです。また、周期境界条件により均一系の性質には強いが不均一系には弱いといえます。

ナノシミュレーション

・ナノテクノロジーとは

ナノテクノロジーとは、原子や分子を自由に操作・制御したり、物質の構造・配列を制御することで、新機能や優れた特性を持つ物質を作り出す技術のことを言う。

今、なぜナノテクノロジーが注目され始めてるのかと言うと、半導体分野においての

従来の技術では素子の最小寸法は130nmに達している。しかし、100nmを下回る半導体集積回路を構成しようとするると実現困難な壁が存在している。また、磁気ディスク分野においても従来技術の限界として、1テラビット／平方インチ以上の記録密度では、安定な記録再生ができなくなると言われている。磁気が熱運動に負けて安定に保持できなくなるためらしい。ナノテクはこうした従来の限界を打ち破り、革新的技術の確立に向けて期待されている。

・ナノテクと量子力学

ナノテクを話すためには量子力学の簡単な知識が必要になる。ここでは、ナノテクと量子力学の関わりを記す。

原子の構成は原子核と電子によって成りたっているが、電子は粒子と波の両方の性質を持つため、極めて不可解な現象を観測できる。たとえば、電子を電子銃によってスリッドを通して壁面に当てると、干渉縞が観測できる。この事から電子はけっして粒子としての性質だけを持つのではなく、波としての性質をも持っている事が分かる。電子軌道の円周長が第一軌道を基底として整数倍になることも、前述で述べた事が要因となっている。量子力学が示す電子像として、電子は観測された時点でのみその存在が定義できる。（*哲学的になってしましますが・・・。）常に存在している位置が確実に定義できるのではなく、確率的にそこに存在しているかどうかのみ推測する事が出来るとなっている。すなわち、閉じた箱の内部に電子があっても、電子が箱の外に存在する事もあり得る。これをトンネル効果といい、この特殊な性質を利用したものが後に記す"STM"(走査型トンネル顕微鏡)である。

このような電子の謎を解明した物理学が「量子力学」であり、これによって、トンネル効果などの奇妙な現象を明確に説明することができる。そして、ナノテクノロジーは量子力学に基礎をおいている事になることをわかってほしい。

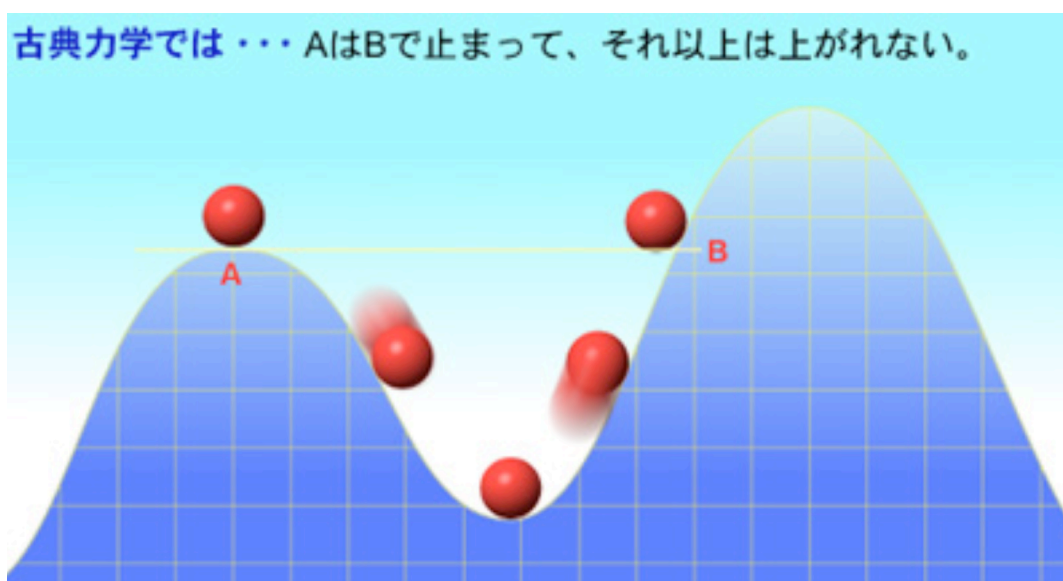


図2.古典力学

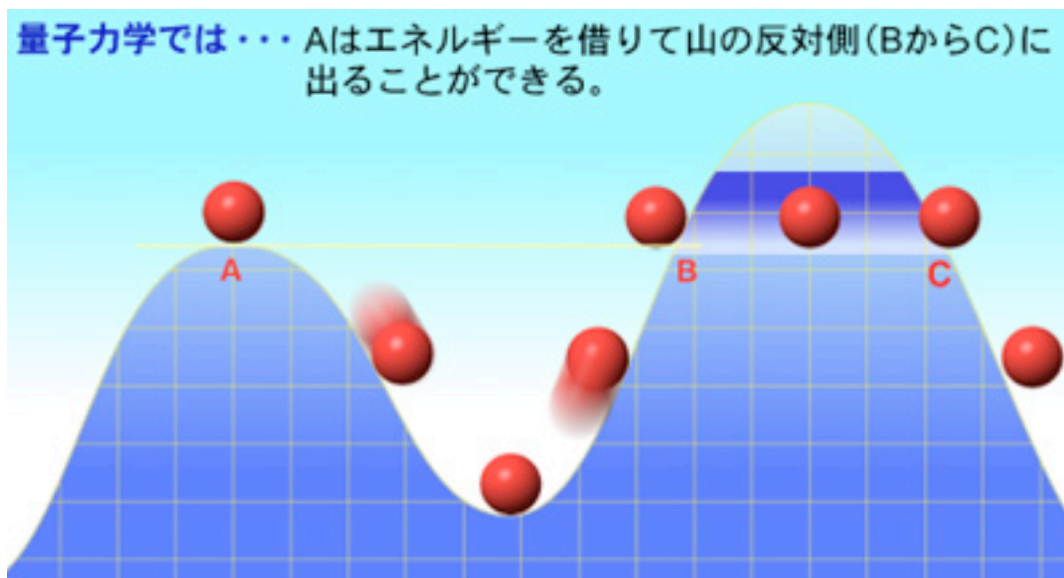


図3.量子力学

・計測、加工分野とナノテク

現代の半導体エレクトロニクスでは微細加工技術が必要になってきている。しかし、こうした加工技術が確立されていない。そこで超微細加工を実現するのが " STM (走査型トンネル顕微鏡) " や " AFM (原子間力顕微鏡) " を中心とした、走査型プローブ顕微鏡 (SPM) で超微細加工ができる。" SPM " とはプローブ (極めて微細な金属の探針) を走査する新しいタイプの顕微鏡である。" SPM " は探針と試料表面原子との間に生じるトンネル電流 (トンネル効果によって流れる微細な電流) や原子間力 (原子同士の引力や反発力) などの物理量を測定し、その測定値が一定となるように探針を走査することで原子レベルでの凹凸を観察するものである。電子顕微鏡ではほとんどできなかった高い垂直分解機能を実現している。" SPM " の代表的なものとして " STM " (走査型トンネル顕微鏡) や " AFM " (原子間力顕微鏡) がある。

" STM " (走査型トンネル顕微鏡) は試料表面と探針との距離によって、電圧が指数関数的に変化する性質を利用して表面の形状を正確に描写する事が出来る。

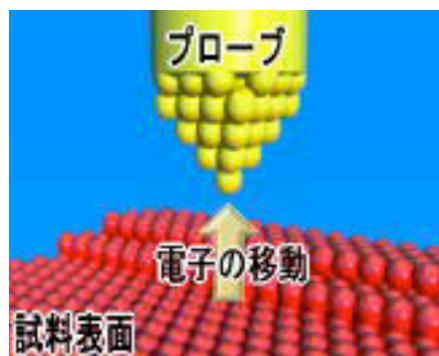


図4.STMのイメージ

しかし、" STM " は絶縁体の観測が不可能なことに対して、" AFM " (原子間力顕微鏡) は、原子間力を利用することによって絶縁体の観測も可能である。

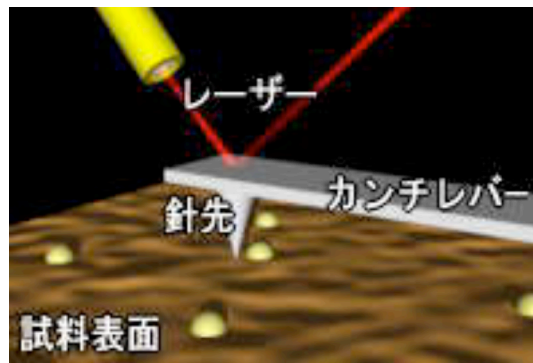


図5.AFMのイメージ

これら2つの "SPM" を利用します。"STM" は観測用の探針をピンセットのように用いて分子を1個ずつ自在に加工します。"AFM" は探針をペンのように利用して、分子1個ずつをインクのようにたらし加工します。つまり、原子や分子のレベルで加工ができるので100nmよりもはるかに小さな精度で物体を微細加工することができるわけです。

・ナノテクノロジーとシミュレーション

有用な機能を発現するようなナノ構造体の設計において、理論・計算機シミュレーション技術を用いることによる、高効率化が「ナノシミュレーション」である。ナノレベルの計測や実験は実際には容易でないため、研究開発の効率化の観点から、実験の前にコンピュータシミュレーションを行ない、有用な結果を得たものについて、研究開発の対象を絞り込んでいく方法として、ナノシミュレーションが求められている。

ナノシミュレーションの適用分野として、例えば、半導体の開発のためのデバイス設計CAD、製造装置シミュレーション、表面詳細解析、材料設計などがある。コンピュータの神経細胞とも言える、トランジスタの材料となっているのがシリコンである。100ナノメートルのトランジスタは、1億個のシリコンが規則正しく整列した結晶から作られているが、このように、きれいな結晶を作り出すために、コンピュータシミュレーション技術を用いる。

次世代の機能材料の創製・開発のためには、分子をナノスケールで精密に制御することが必要である。このためには、コンピュータシミュレーション上で分子を構築し、分子レベルでの構造や物性のシミュレーションに加えて、これら分子の集合体をナノオーダーで制御するために分子間の相互作用もシミュレーションする必要がある。原子または分子のシミュレーションで、ナノスケールの複雑な現象を予測するためには、量子力学に基づくシミュレーションが求められる。そのためにも、シミュレータの開発に力を入れる必要がある。

・ナノテクの新素材からシミュレータの必要性を考える

現在、ナノテクによる新材料は様々な産業分野で技術革新や新事業の創出を促してい

る。その代表としてナノ材料や炭素系の新素材、フラーレンやカーボンナノチューブなどがある。中でも、フラーレンは大きさ、約0.7nmの炭素原子である。フラーレンの特徴としては、不活性で毒性がなく、また、非常に小さいのでタンパク質やウイルスなどと相互作用を起こしやすい。それから、中空構造をしているため、内部に薬品を挿入する事も可能である。さらに、フラーレンは人体に有害な活性酸素を効率よく吸収する性質がある。

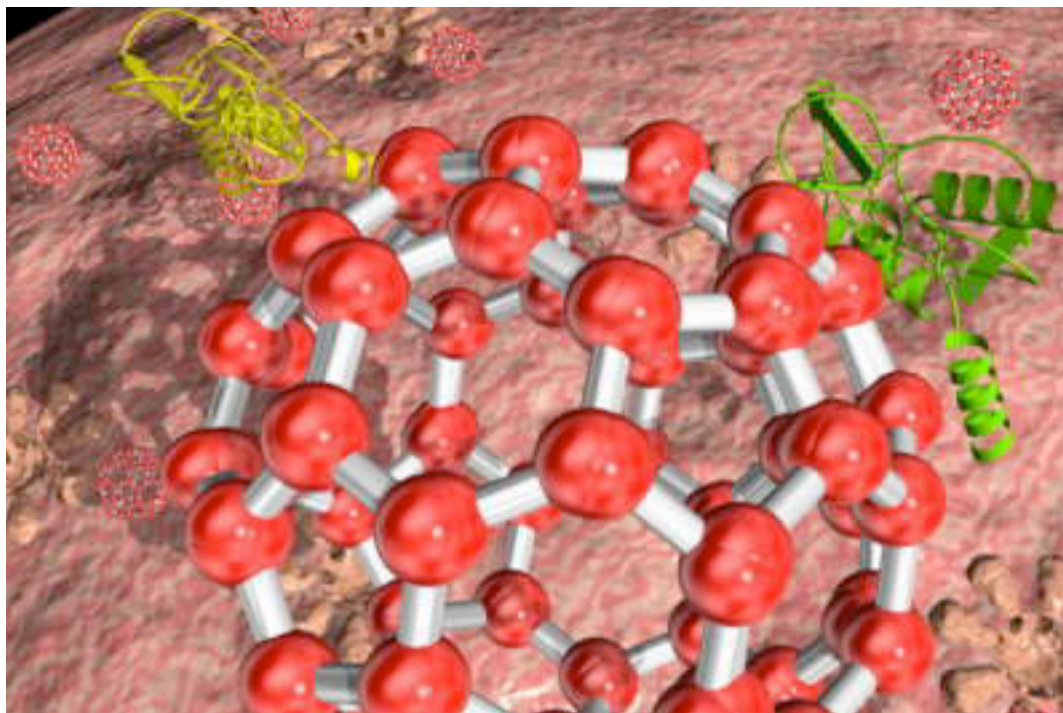


図6.フラーレンのイメージ

それらの特性を活かして医療分野やエレクトロニクス分野などで実用化が期待できる。

その中でも、フラーレンのもっとも重要な応用分野は医療・医薬と考えられる。研究例として、骨粗鬆症の治療に有効な骨形成促進薬を運ぶフラーレンの開発や、癌治療の際に抗ガン剤を患部まで運ぶフラーレン、そしてガン細胞のDNAの一部を切り取らせて殺すフラーレンの研究が行われている。ほかにも、フラーレンには活性酸素を捕らえて排出させる作用がある事から活性酸素が原因となる体の老化を防ぐ事ができるとも考えられている。

フラーレンの研究・開発はナノレベルで行われるので、コンピュータによるナノシミュレーションの開発は重要な部分を占めている。ナノテクノロジーは原子・分子を自在に制御する事によって、新物質を開発するための基盤技術である。しかし、開発の際に様々な組み合わせを実験していけば効率が悪い。そこで、所望の特性を有する材料の生成に必要な原子や分子は何か、また、どのような分子構造でいかに組み合わせれば良いか、などを短時間に予測できる事が重要になってくる。これらの事を果たす上でシミュレーション技術は重要なツールとなる。

ナノシミュレーションには、大きく分けて二つの計算方法がある。一つ目は量子動

力学法（Quantum Dynamics Method：QD法）。これは、原子・分子の挙動を厳密に調べるために、波動方程式を用いて力学的振る舞いを解析する。この方法は、厳密な解析を行えるが、計算時間が非常にかかるという欠点を持つ。二つ目は分子動力学法（Molecular Dynamic Method：MD法）がある。これはニュートンの運動方程式と分子間力などを組み合わせる事で、ミクロな世界での原子・分子の挙動を把握できる。この方法は比較的短時間で計算できるが、厳密な解析ができない。これらの点をふまえて、新たな量子分子動力学法（Quantum Molecular Dynamics Method：QMD法）も考案されているが、これもまだ計算能力に限界がある。そのため、現在では、量子力学的な効果を含まないMD法で計算する方法が主流である。

現在のコンピュータではQMD法などの負荷の大きい計算法を現実的には処理できない。コンピュータの処理速度は、高性能なCPUによって予測もつかない程の進歩が見られる。また、量子コンピュータの実用化がなされれば、ローコストでより厳密なシミュレーションが可能になる。その点からも、厳密なシミュレーションは負荷が大きすぎて、コンピュータ技術が追い付いていない状況である。

できること(応用)

これら物質創造支援シミュレータで新しい物質をつくったり、いろいろな環境で実験することができる。これによって安全に実験が行えたり、実験費用が低コストに抑えられ、予期しない危険物質の発生を伴わないため環境汚染の心配が無い、存在量の少ない貴重な物質を無駄に浪費しなくても済みます。

例えば、温度、湿度、圧力などの数値を変えたり、大気圏、水中、宇宙などの環境を変化させたりする。これによってその物質におきるさまざまな現象を確認することができる。

また、物質を複合させることによって複合材料を開発する。これによって超軽量・高強度・超耐熱などの従来にない卓越した特性を発揮する新材料の開発が期待できる。これらの特性は航空宇宙分野で要求される要素である。

ほかには新物質を自ら創造することで、新しい分野を切り開くことができるかもしれない。

複雑な分子の動きをシミュレーションで解析

生物が生きていくためには、食物摂取によるアミノ酸の吸収が必要不可欠です。自然界にはこのアミノ酸を作り出す酵素が存在することが知られている。超好熱古細菌から抽出された酵素もその一つです。本酵素は、アスパラギン酸というアミノ酸を作り出すことが実験による研究から分かっていたのですが、その生化学合成のメカニズムは不明でした。酵素分子がちょうど貝のような形をしていること、貝の2つのつの先に生合成を担う硫黄原子を含んだ部分が散在することから、酵素が「貝を閉じる」ことによって目的のアミノ酸の原料となる化学物質を捕まえ、生合成を行うのではないかと考えられています。シミュレーションにより2つの硫黄原子は互いに近づいた

り、遠ざかったりしており、分子が貝のような動きをするという推測を支持する結果がでた。

このように実験による観測が難しい分子の動きをコンピュータ上で再現できるというシミュレーションは有効である。

医療とシミュレータ

これらのシミュレータを使って生命科学の分野でも大いに期待できる。分子同士が相互作用してできる複雑なネットワークをコンピュータ上に再現する。どの分子がどのようなネットワークのどこに位置し、どの分子と相互作用して表現型としてあらわれるのかがわかりません。このような生命現象にかかわるすべての分子ネットワークを解明することが分子レベルでヒトを完全に理解したことになる。それによりヒトをコンピュータ上に再現することができる。

これによって医療や薬の作り方などがまったく変わってしまう。病気の原因となっている遺伝子と、その遺伝子がかかわっている分子ネットワークがわかっているならば、そのネットワークにかかわる分子にはたらきかける薬を設計してつくることができる。しかもネットワークのどこに位置し、どんな形の分子に作用するかがわかっているので、効果や副作用の強さも予測できる。

これによって治療法が個人個人の体質にあわせたものになる。さらには病気に対して理論的に治療法を選択し、その結果も予測できるようになるかもしれない。

また、21世紀には、医療は「治療」から「予防」へシフトされるとされているだろう。

ほかにも生産性の高い植物をつくる、薬理作用をもった植物をつくる、バルブなどのために質の良い木をつくるなど、食料や環境の応用への対応がある。

まとめ

現代では、シミュレータが進展すると安全かつ低コストでいろいろなことがシミュレーションできます。これによっていろいろの分野で発展・開発が大幅に進むことでしょう。ゆえにこれからはよりよいコンピュータシミュレータをつくりだす必要があります。それにはシミュレーションの方法、コンピュータ自身の性能も上げる必要があります。

また、量子レベルまで再現できるようになればコンピュータ上に仮想現実ができるかもしれません。もしかしたらすでにわたしたちの世界が仮想現実なのかもしれません。

参考文献

[1] 図解雑学 ナノマシン 著者:小林 直哉 出版社:ナツメ社

[2] コンピュータ・シミュレーションの基礎 著者:岡崎 進 出版社:化学同人