

コンピュータでみる 物理，化学，生命の世界

理学部新歓企画『理学部新歓サイエンスカフェ』

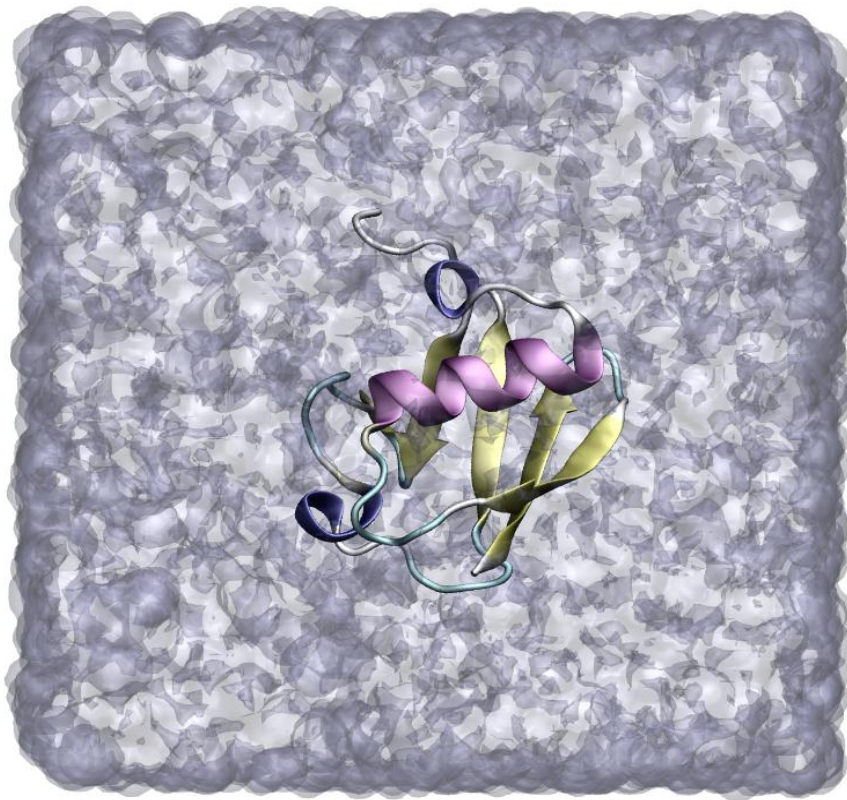
2011年4月12日

理学部南館

理学研究科 物質理学専攻（物理系）

森 義治

複雑な物質の物理



水中にあるタンパク質

- 左の図のような複雑な物質を理解するためにはどうしたらよいのだろうか？

一つの方法はコンピュータを用いた

シミュレーション！



シミュレーションに用いられるもの



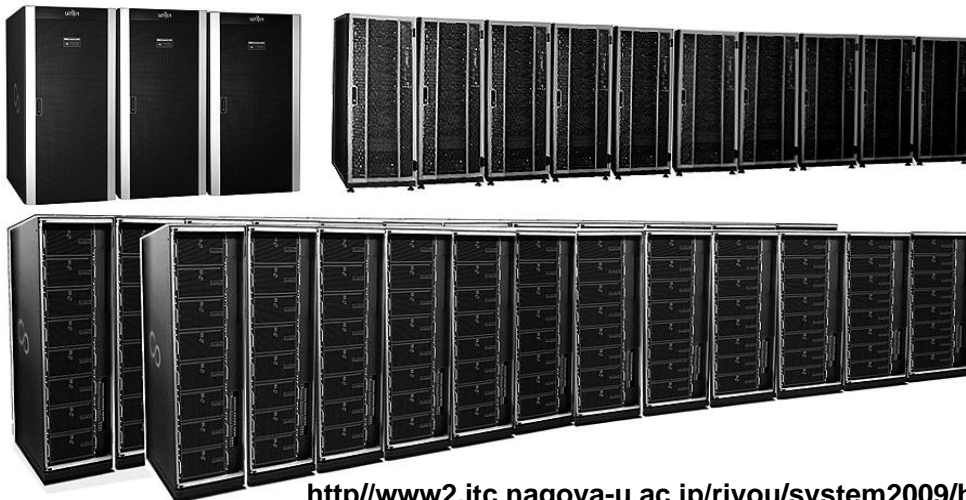
家庭用のパソコン

<http://www.dell.com/jp/p/inspiron-580/pd>

ゲーム機 (PS3)



http://blogs.yahoo.co.jp/home-coming-day/hcd_6/event/public/opening.html



<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/riyou/system2009/htm>

名古屋大学のスーパーコンピュータ

ニュートンの運動方程式

- 粒子の運動はニュートンの運動方程式で記述できます。運動方程式は以下のようなものです。

$$F = ma$$

粒子にはたらく力

粒子の質量

粒子の加速度



シミュレーションの基本的な考え方

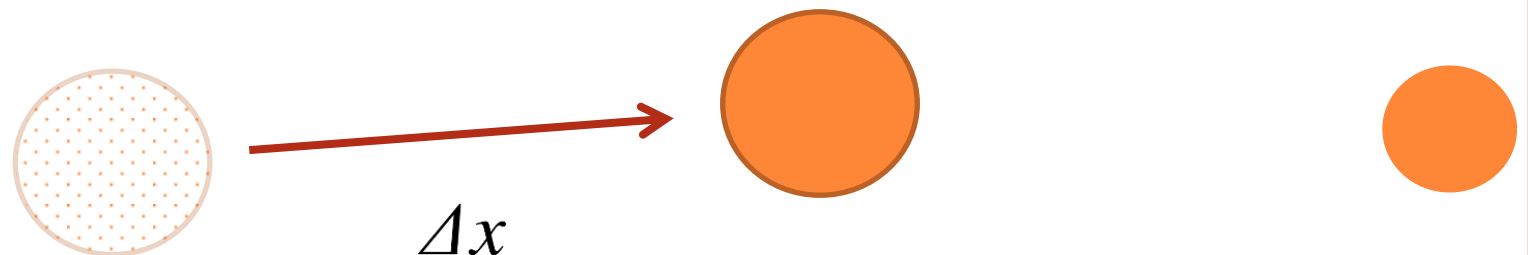
- 粒子の加速度は次のように書けます。

$$a(t) \doteq \frac{\Delta v}{\Delta t} \quad (\Delta t \doteq 0) \quad \Delta v \doteq a(t)\Delta t$$

- また粒子の速度は次のように書けます。

$$v(t) \doteq \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (\Delta t \doteq 0) \quad \Delta x \doteq v(t)\Delta t$$

- こうすることで、粒子の座標の変化を計算できます。これを繰り返すことによりシミュレーションが実行されます。

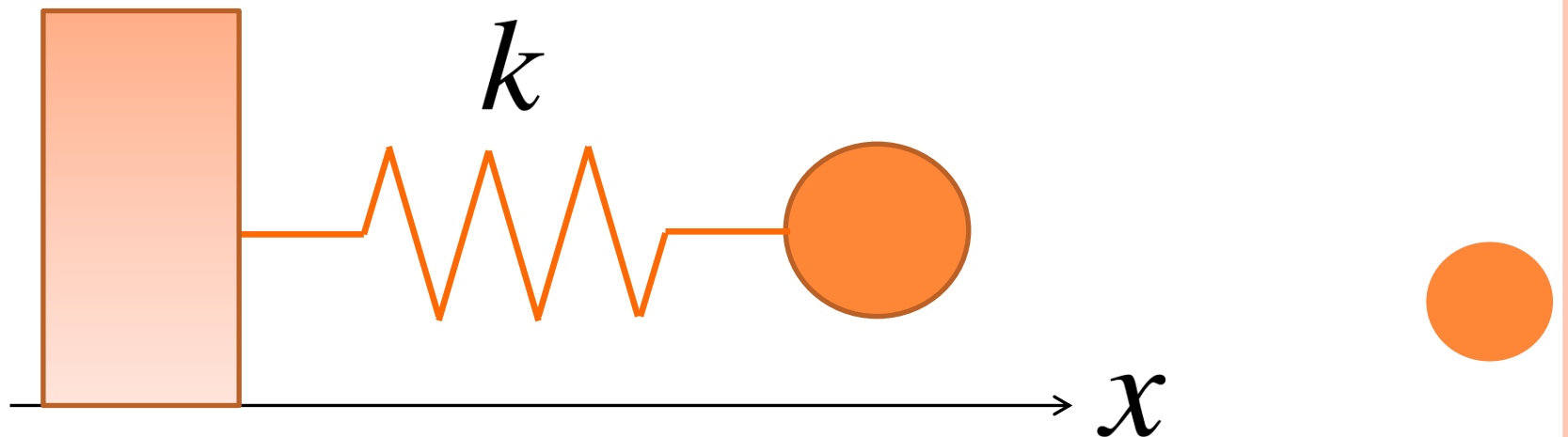


バネの運動

- 粒子がバネから受ける力は以下のような式で表されます。

$$F = kx$$

粒子にはたらく力 バネ定数 粒子の変位



ニュートンの運動方程式（多数の粒子）

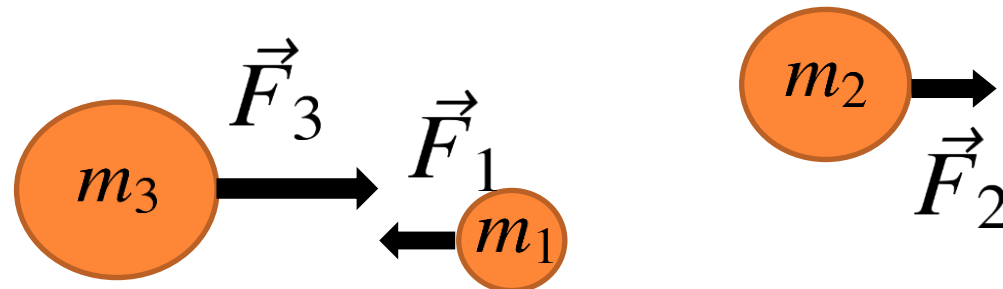
- 粒子がたくさんあるときの運動方程式も同様です。このときのニュートンの運動方程式は以下ようになります。

$$\vec{F}_i = m_i \vec{a}_i$$

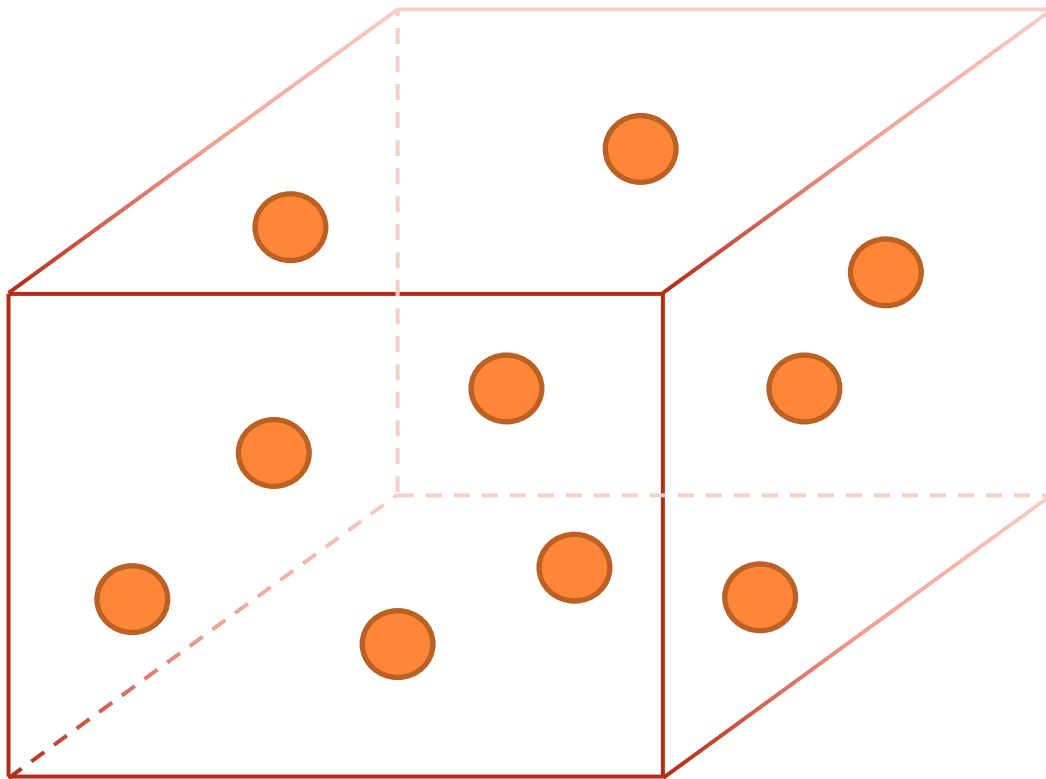
粒子 i にはたらく合力

粒子 i の質量

粒子 i の加速度



単原子理想気体の運動



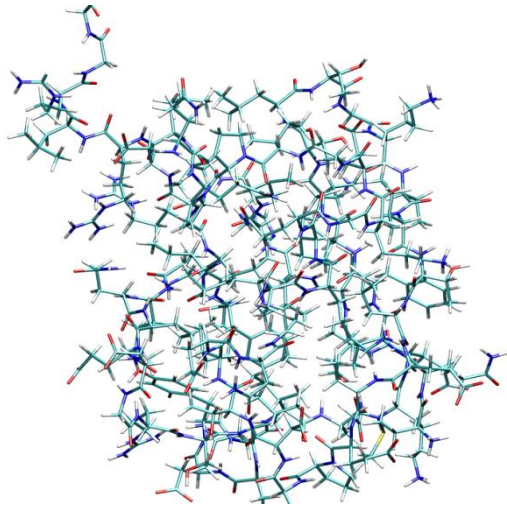
- 箱に入ったたくさん
の粒子を考えま
す。理想気体とし
て扱い、力は箱に
ぶつかったときの
み働くと考えます。

$$\vec{F}_i = 0$$

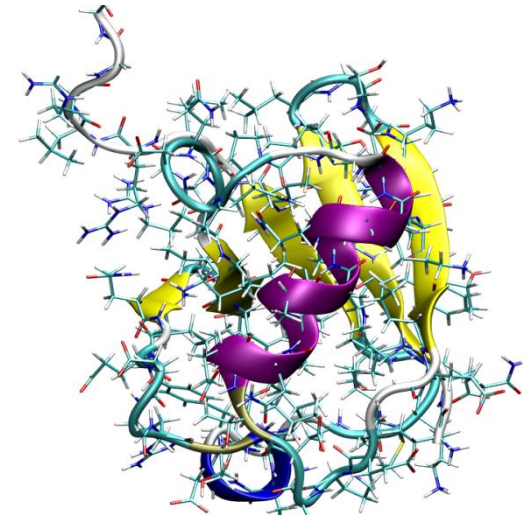


生体分子のあらわし方（描き方）

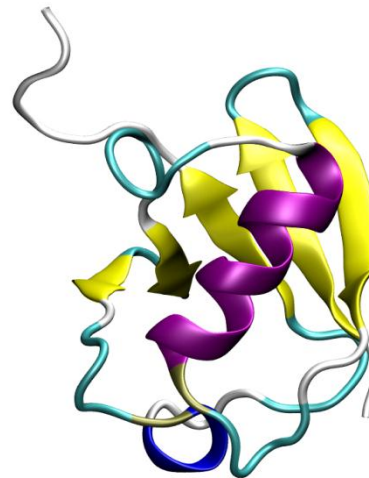
- すべての原子とその間の化学結合が描かれている



- タンパク質の骨格部分を強調したもの



- タンパク質の骨格部分だけ描いたもの



生体分子のシミュレーション

- タンパク質とそのまわりの水を模式的に描いたもの
- シミュレーション中ではすべて原子として扱っている！

