# LAMMPSを用いた有機低分子の誘電率計算に関する専門的レビュー：外部電場印加法を中心に

## 要旨

本報告書は、分子動力学（MD）シミュレーションソフトウェアであるLAMMPSを用いて、低分子量有機分子の誘電率を外部電場印加法によって計算する手法に関する包括的なレビューである。この分野は、材料科学や電気化学における分子レベルの挙動を理解する上で極めて重要である。分析の結果、外部電場印加法は、特に誘電応答が弱い非極性分子や低極性分子の誘電率を計算する上で有効な手法であることが示された。しかし、その成功は、シミュレーションパラメータの慎重な選択と、根本的な物理的・計算的課題の深い理解に依存する。

本報告書では、誘電率の計算に関連する理論的背景から始め、外部電場法と一般的なゆらぎ法を比較し、それぞれの利点と限界を明確にする。また、計算の精度に不可欠な要素であるフォースフィールドの選択、周期境界条件（PBC）と長距離静電相互作用の取り扱い、そして誘電飽和を避けるための適切な電場強度の決定について、詳細な分析を提供する。最終的に、LAMMPSを用いた実践的なワークフローを提示し、具体的なコマンドとポストプロセスの手順を解説することで、研究者がこのシミュレーションを成功させるための実践的なガイドを提供する。

## 1. 誘電応答の理論的基礎：微視的性質と巨視的性質の橋渡し

### 1.1 誘電率の巨視的概念と誘電定数 **ϵ**

誘電率（permittivity）は、誘電体材料の電気分極の度合いを示す物理量であり、ギリシャ文字 ϵ で表される。この物理量は、外部電場にさらされた際に材料がどれだけ多くの電気エネルギーを蓄積し、静電相互作用を遮蔽できるかを測る尺度である。誘電定数（dielectric constant）または比誘電率（relative permittivity） ϵr​ は、その材料の誘電率 ϵmaterial​ と真空の誘電率 ϵ0​ の比として定義される、無次元の量である。

ϵr​=ϵ0​ϵmaterial​​

誘電率が高い材料は、低い材料に比べて外部電場をより効果的に遮蔽する。この特性は、イオン性化合物の溶解度を理解する上で特に重要である。例えば、誘電率が非常に高い極性溶媒である水（ϵr​≈80）は、イオン間の静電相互作用を効果的に遮蔽するため、イオン性化合物の優れた溶媒となる。対照的に、誘電率が低い非極性溶媒であるヘキサン（ϵr​≈2）は、イオン性化合物の静電相互作用を弱める能力がほとんどないため、貧溶媒となる 1。

### 1.2 分極の微視的メカニズム

誘電率の巨視的な性質は、分子レベルでの二つの主要な分極メカニズムに起因する。

1. **電子分極（Electronic Polarization）**: これは、外部電場によって分子の電子雲が原子核に対して変形し、誘起双極子モーメントが生じる普遍的かつほぼ瞬時の応答である 2。非極性分子（例：アルカン、ベンゼン）は永久双極子モーメントを持たないため、この電子分極が誘電率の唯一の起源となる 3。
2. **配向分極（Orientational Polarization）**: これは、永久双極子モーメントを持つ分子（極性分子、例：水、アセトン）が、外部電場の方向に向きを変えることで生じる応答である 2。このプロセスは、分子の回転や配向の変化を伴うため、電子分極に比べてはるかに遅く、また温度に依存する 2。古典的なMDシミュレーションにおいて、固定電荷フォースフィールドは、この配向分極を主に表現する。

ユーザーが関心を寄せている「低分子量有機分子」には、ヘキサンのような非極性分子からアセトンのような中程度の極性を持つ分子まで含まれる。この分子の多様性は、誘電率の計算に固有の課題をもたらす。非極性分子の誘電率は、完全に電子分極に依存しており、これは高速な量子力学的効果である 5。しかし、多くの一般的な古典的MDシミュレーションに用いられる固定電荷フォースフィールドは、この純粋な電子分極効果を直接モデル化する能力を本質的に欠いている。これらのモデルは原子に固定された部分電荷を割り当てることで分子間相互作用を近似するため、分子の電子雲が外部電場や周囲の環境に応じて変形する様子を表現できない 2。この根本的な制限は、非極性および低極性溶媒の誘電率をシミュレーションで正確に再現することがなぜ難しいのかを説明する。

## 2. 誘電率の計算手法

誘電率を分子シミュレーションから算出する手法は主に二つあり、それぞれ異なる理論的枠組みに基づいている。

### 2.1 ゆらぎ法（平衡MD）

ゆらぎ法は、ゆらぎ-散逸定理（fluctuation-dissipation theorem）に基づく平衡MDシミュレーション手法である。この定理は、平衡状態にある系の自発的な熱的ゆらぎと、外部からの摂動に対する系の応答が関連していることを示す。誘電率の計算においては、外部電場が存在しない平衡MDシミュレーションから得られる、シミュレーションボックス全体の総双極子モーメントのゆらぎを解析する 1。

特に、Kirkwood-Fröhlich理論は、総双極子モーメントの平均二乗ゆらぎと誘電率を関連付けることで、この手法に物理的な根拠を与えている。この理論は、分子間の双極子相関を考慮に入れるKirkwoodのg因子を導入する。ゆらぎ法は、系の自発的な挙動を測定するため、外部摂動に起因する非物理的なアーティファクトを導入しないという利点がある。しかし、収束には非常に長いシミュレーション時間が必要となることが欠点である。特に、総双極子モーメントのゆらぎが遅い系や、系全体の平均双極子モーメントが小さい系では、ゆらぎがノイズに埋もれてしまい、正確な統計を得るために膨大な計算コストがかかる。

### 2.2 外部電場法（非平衡MD）

外部電場法は、ユーザーの関心に直接関連する手法であり、線形応答理論（linear response theory）に基づく非平衡MDシミュレーション手法である。この手法では、シミュレーション中に系に定常的または周期的な外部電場 E を印加し、その結果生じる総分極 P を測定する 2。電場が十分に弱い線形応答領域では、分極

P は電場 E に線形に比例し、この比例関係から誘電感受率 χ が導出される。誘電感受率は、誘電率 ϵ と以下の関係にある。

ϵ0​ϵ​=1+χ

### 2.3 計算手法の比較分析

ゆらぎ法と外部電場法の両方は、線形応答の仮定が満たされていれば、理論的に同じ誘電率を導出する 6。しかし、両手法にはそれぞれ固有の利点と課題が存在する（表1を参照）。

ゆらぎ法は、系を平衡状態で保つため、外部電場が引き起こす可能性のある非物理的な構造変化（例：誘電飽和、electrofreezing）のリスクがない。しかし、ゆらぎはシミュレーションボックスのサイズや静電境界条件に強く影響される。また、特にゆらぎが小さい非極性分子の場合、ノイズに対して信号が弱くなり、統計的に有意な結果を得るために極めて長いシミュレーション時間が必要となる 8。

一方、外部電場法は、誘電応答を直接的に引き起こすため、ゆらぎ法に比べて、誘電率が低い系や双極子モーメントが小さい分子でも、分極応答を明確に捉えることができる 7。電場強度を制御することで、分極応答の「信号」を調整し、収束を早めることが可能である 7。しかし、この手法の信頼性は、シミュレーションが線形応答領域内に収まっているかに完全に依存する。

したがって、低極性・非極性の有機分子を扱うユーザーのケースでは、外部電場法が特に有効であると考えられる。これは、ゆらぎ法では捉えにくい微弱な誘電応答を、制御された方法で増幅して測定できるためである。ただし、この手法を適用する際には、電場強度を慎重に選択し、線形応答の仮定が破綻しないように注意を払う必要がある。

| 特性 | ゆらぎ法（平衡MD） | 外部電場法（非平衡MD） |
| --- | --- | --- |
| **理論的基礎** | ゆらぎ-散逸定理、Kirkwood-Fröhlich理論 | 線形応答理論 |
| **シミュレーション** | 外部電場なしの平衡シミュレーション | 外部電場を印加した非平衡シミュレーション |
| **計算対象** | 総双極子モーメントの自発的ゆらぎ ⟨M2⟩−⟨M⟩2 | 印加電場 E に対する平均分極 ⟨P⟩ |
| **利点** | 物理的に直感的、外部摂動なし | 応答を直接測定、収束が早い場合がある、誘電飽和の調査が可能 |
| **課題** | 統計的精度が低い場合がある、長いシミュレーションが必要、静電境界条件の影響を強く受ける | 線形応答領域の特定が必須、電場が非物理的な構造変化を引き起こす可能性がある |
| **最適な用途** | 強い双極子相関を持つ系、高い誘電率の系 | 弱い双極子相関を持つ系、低い誘電率の系、誘電飽和現象の調査 |

**表1：誘電率の計算手法の比較**

## 3. 分子動力学シミュレーションにおける重要事項

### 3.1 フォースフィールドの選択：電子分極と電荷スケーリングの課題

誘電率の正確な計算は、使用するフォースフィールドの選択に強く依存する。多くのMDシミュレーションで一般的に用いられる非極性化可能な（固定電荷）フォースフィールド（例：OPLS-AA、CHARMM）は、そのパラメータ化の性質上、誘電率の予測を系統的に過小評価することが知られている 5。例えば、アセトンをOPLS/AAモデルでシミュレーションした結果、実験値21に対して誘電率15が報告されている 13。この問題は、これらのモデルが分子の電子雲の変形によって引き起こされる電子分極を明示的に考慮していないことに起因する 2。

非極性フォースフィールドは、凝集相の誘電率を間接的に表現するために、ガス相の値よりも大きな有効部分電荷を使用することで、平均的な電子分極効果を取り込もうとしている 2。しかし、この「ワンサイズ・フィッツ・オール」のアプローチは、分子の局所的な化学環境に応じて分極応答が変化するという事実を無視している。この制限は、特に低誘電率環境（例：タンパク質の内部、非極性溶媒）で顕著となる。例えば、非極性アルカンを固定電荷モデルでシミュレーションすると、誘電率は実験値の約2に対して1に近い値となり、著しく過小評価されることが報告されている 17。

この課題に対処するため、より高度なフォースフィールドが開発されている。

* **極性化可能なフォースフィールド**: Drudeオシレーターモデル 9 や誘起点双極子モデル は、原子に補助的な粒子や双極子を導入することで、電子分極を明示的にモデル化する 14。これにより、シミュレーション中の電場変化に分子の電荷分布が動的に応答することが可能となる。これらのモデルは、固定電荷モデルよりも高い計算コストを要するものの、誘電率を含む凝集相の物性をより正確に再現できる。
* **電荷スケーリング**: 実用的な妥協策として、非極性フォースフィールドの電荷を、量子化学計算で得られる値から経験的にスケーリングする手法がある 2。MDEC（Molecular Dynamics in Electronic Continuum）モデルは、このアプローチに理論的根拠を与えている 5。このモデルは、固定電荷が電子連続体（electronic continuum）に埋め込まれていると仮定し、効果的な部分電荷が、真の電荷を電子誘電率でスケーリングしたものであることを示している 5。これは、非極性分子の誘電率が主に電子分極に起因するという事実と整合しており、非極性溶媒の過小評価問題の解決に役立つ 5。

| モデルタイプ | 分極処理の概要 | 利点 | 課題 |
| --- | --- | --- | --- |
| **固定電荷** | 有効電荷で電子分極を暗黙的に補正 | 計算コストが低い、実装が容易 | 誘電率の系統的過小評価、局所環境への不十分な応答 |
| **極性化可能** | Drudeオシレーターや誘起双極子で分極を明示的にモデル化 | 誘電率のより正確な予測、物理的表現の向上 | 計算コストが高い、実装が複雑 |
| **電荷スケーリング** | 電子連続体モデルに基づき電荷をスケーリング | 固定電荷モデルに近い計算効率、精度の改善 | 経験的パラメータに依存 |

**表2：フォースフィールドによる分極処理の比較**

### 3.2 周期境界条件と静電相互作用

分子シミュレーションにおいて、バルク液体を模倣するために周期境界条件（PBC）は不可欠である 22。しかし、外部電場を印加する場合、PBCは特有の課題をもたらす。双極子が電場に沿って整列すると、周期的なイメージ間で総双極子モーメントが蓄積し、無限遠での境界条件に依存する問題を引き起こす。

この問題を扱う標準的な手法であるEwald和（Ewald summation）は、デフォルトで「導電性（conducting）」または「tin-foil」境界条件を課す。この設定では、系が純粋な双極子モーメントを形成する際にペナルティが課されないため、印加電場よりも大きな実効電場が生じる可能性がある。

このアーティファクトを修正するためには、Ewald法で「絶縁性（insulating）」境界条件を使用することが一つの方法である。これは、epsilon-surface（GROMACSの場合）を1に設定することで実現される 25。非等方的な系（例：界面や膜）をシミュレーションする際には、2次元のEwald法とYeh-Berkowitz補正項のような手法が用いられる 26。このような境界条件の選択は、長距離双極子相関と誘電応答の正確な記述に決定的な影響を与える 29。

### 3.3 誘電飽和と線形応答領域

外部電場法は、誘起分極が印加電場に比例するという線形応答の仮定に基づいている。この仮定が成立する電場強度（線形応答領域）を特定することが極めて重要である。電場が強すぎると、分極応答は飽和し始め、非物理的な非線形挙動を示す。この誘電飽和は、双極子が電場と熱エネルギー（kB​T）のバランスを超えて電場方向に強く配向することで引き起こされる。

非線形応答の開始点は、分子の極性に依存する。極性溶媒（例：水、アセトニトリル）の場合、非線形挙動は比較的弱い電場（約0.03 V/nm以上）で観察され始める。非常に強い電場は、双極子を整列させ、固化させる「electrofreezing」という現象を引き起こすことさえある 9。

したがって、適切な電場強度を決定するには、経験的なアプローチが不可欠である。電場が弱すぎると、分極応答の信号がノイズに埋もれ、結果が統計的に信頼できなくなる 8。逆に強すぎると、結果は非物理的なものとなる 31。このジレンマを解決するため、複数の異なる電場強度でシミュレーションを実行し、その結果をゼロ電場に外挿する手法が推奨される 7。この反復的なプロセスは、一見単純に見える計算を、線形応答領域を厳密に特定する科学的な実験へと変える。

| 分子 | 極性 | 永久双極子モーメント (D) | 線形応答の限界 (V/nm) | 備考 |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 水 (H2​O) | 極性 | 約1.85 | 0.03 - 0.15 | 強い電場下で誘電飽和 30 |
| アセトニトリル (CH3​CN) | 極性 | 約3.92 | 約0.03 | 強い電場下で配向が変化 30 |
| ジクロロメタン (CH2​Cl2​) | 極性 | 約1.60 | 約0.278 | 2dE≈kB​Tの基準 |
| ベンゼン (C6​H6​) | 非極性 | 0 | 調査対象外 | 主に電子分極が寄与 9 |
| ヘキサン (C6​H14​) | 非極性 | 0 | 調査対象外 | 固定電荷モデルでは誘電率が過小評価される 5 |

**表3：誘電率シミュレーションにおける線形応答の電場強度目安**

## 4. LAMMPSでの実践的実装とワークフロー

### 4.1 LAMMPSコマンドの正しい解釈

LAMMPSで誘電率を計算しようとする際に、dielectricコマンドが誘電率を計算するためのツールであると誤解されがちである。しかし、これは間違いである。dielectricコマンドは、シミュレーション環境の静電相互作用を調整するための**設定コマンド**である 33。このコマンドは、クーロン相互作用の分母に値を設定することで、系の静電遮蔽効果を暗黙的にモデル化するために使用される。

例えば、dielectric 2.0は、全てのクーロン相互作用の強度を50%に低減する 33。これは、周囲の連続体が誘電率2.0を持っていると仮定する場合に有用である。したがって、このコマンドは誘電率の

**計算**には使用できない。

### 4.2 正しいワークフロー：電場印加とポストプロセス

外部電場印加法で誘電率を計算するための正しいワークフローは、以下の通りである。

1. **系の構築**: シミュレーションボックスに低分子量有機分子の液体モデルを構築する。PBCを適用する 24。
2. **電場印加**: LAMMPSでは、fix efieldコマンドを用いて外部電場を印加する。このコマンドは、系内の全ての荷電粒子に力を加え、全系にわたって均一な電場を生成する。例えば、x方向に0.04 V/nmの静的電場を印加するには、以下のコマンドを使用する 25。  
   fix 1 all efield 0.04 0.0 0.0
3. **シミュレーションの実行**: NVTまたはNPTアンサンブルで、電場印加下でシミュレーションを実行する 34。系が電場に対する定常的な分極応答に達するまで、十分な長さで平衡化を行う必要がある。
4. **ポストプロセス**: LAMMPSには、GROMACSのgmx dipolesのような、総双極子モーメントを自動的に計算する専用のツールは組み込まれていない。したがって、ユーザーはシミュレーションの軌道ファイル（\*.dumpまたは\*.xyz）から、各原子の電荷と位置情報を用いて、手動で総双極子モーメントを計算する必要がある。

### 4.3 誘電率の計算

誘電率 ϵr​ は、シミュレーション後のデータ解析によって計算される。印加電場の方向をx軸とすると、誘電感受率 χ は、印加電場 Ex​ と測定された平均分極 Px​ の比から決定される。

Px​=V⟨Mx​⟩​

χ=ϵ0​Ex​Px​​

ϵr​=1+χ

ここで、V はシミュレーションボックスの体積である。⟨Mx​⟩ は、シミュレーションの定常状態における総双極子モーメントの平均値である。

## 5. 文献に見るケーススタディ

誘電率のシミュレーションに関する文献は、フォースフィールドの選択がいかに重要であるかを明確に示している。

### 5.1 非極性分子と低極性分子の例

* **ベンゼン**: ベンゼンは永久双極子モーメントを持たない非極性分子である。ある研究では、電荷移動と誘起点双極子相互作用を組み合わせたモデル（CT-PDIモデル）を用いて、液体ベンゼンの誘電率が計算された 32。その結果、ゼロ周波数での電子分極による誘電率の寄与は2.3となり、実験値の2.2と非常に良く一致した 32。これは、電子分極を適切にモデル化するフォースフィールドを使用すれば、非極性分子の誘電率も正確に計算できることを示す重要な事例である。
* **アルカン（ヘキサン）**: 非極性アルカンであるヘキサンのシミュレーションでは、固定電荷モデルを使用すると、実験値が約2であるにもかかわらず、誘電率が1に近い値しか得られないことが報告されている 5。これは、固定電荷モデルが電子分極の効果を全く考慮できないことの直接的な証拠であり、この種の系には不適切であることを裏付けている 5。

### 5.2 極性分子の例

* **アセトン**: アセトンは比較的高い極性を持つ分子である。ある研究では、アセトンの誘電率が複数のフォースフィールド（TraPPE\_UA、OPLS/AA、CGenFF）を用いてシミュレーションされた 13。その結果、CGenFFモデルは実験値21に非常に近い23を予測したが、OPLS/AAモデルでは15、TraPPE\_UAモデルでは9という結果となり、モデルによって大きなばらつきがあることが示された 13。これは、一見適切に見える固定電荷フォースフィールドでも、そのパラメータ化の細部によって結果が大きく異なり、「目的適合性」が重要であることを示している。

これらのケーススタディは、シミュレーションの成功が、単純に「分子動力学を実行する」ことではなく、扱う分子の物理的性質を考慮してフォースフィールドを**慎重に選択**することにかかっているという重要な教訓を示している。特定の分子タイプ（極性か、非極性か）に対して適切にパラメータ化されたモデルを選ぶ必要がある。

## 6. 結論と今後の展望

### 6.1 結論の要約

LAMMPSを用いて低分子量有機分子の誘電率を外部電場印加法で計算することは、信頼性の高い結果を得るための有効なアプローチである。しかし、この手法を成功させるためには、以下の3つの核心的な要素に対する深い理解と厳密な管理が不可欠である。

1. **フォースフィールド**: 誘電率が主に電子分極に起因する非極性分子を扱う場合、固定電荷モデルは不適切であり、結果を著しく過小評価する。この課題には、極性化可能なフォースフィールド（例：Drudeモデル）または電荷スケーリング（例：MDEC）といった、電子分極を明示的または暗黙的に補正するモデルを採用することが不可欠である。
2. **境界条件と長距離相互作用**: シミュレーションのアーティファクトを避けるため、Ewald和法における静電境界条件（デフォルトの導電性ではなく絶縁性）の選択に注意を払う必要がある。
3. **電場強度**: シミュレーションは線形応答領域内で実行されなければならない。これには、複数の異なる電場強度でシミュレーションを行い、結果をゼロ電場に外挿する慎重なデータ解析が必要である。この手順は、電場が弱すぎて信号がノイズに埋もれるリスクと、強すぎて誘電飽和や非物理的な構造変化を引き起こすリスクとの間のバランスを取るために不可欠である。

### 6.2 今後の展望

この分野の研究は、計算の精度と効率を向上させる方向で進化を続けている。その一つは、DFT（密度汎関数理論）に基づく\*\*ab initio分子動力学（AIMD）\*\*の進展である。AIMDは、原子核のダイナミクスを追跡しながら、各ステップで系の電子構造を第一原理から解くため、電子分極を正確に表現できる。これにより、経験的なフォースフィールドに頼ることなく、物理的に厳密な誘電応答を捉えることが可能となる。

また、**機械学習（ML）フォースフィールド**の台頭も注目に値する。これらは、少数の高精度なAIMD計算データから学習することで、第一原理計算に近い精度を保ちつつ、古典的なMDシミュレーションのような速度で動作する 35。MLフォースフィールドは、精度と計算コストの間のトレードオフを劇的に改善し、低分子量有機分子の誘電率を正確に予測するための強力なツールとなることが期待されている。これらの技術は、将来的にシミュレーションの信頼性と応用範囲をさらに拡大していくだろう。

#### 引用文献

1. Molecular Simulation and Dielectric Constant - Number Analytics, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://www.numberanalytics.com/blog/molecular-simulation-dielectric-constant>
2. Dielectric constant | MD Simulation Techniques and Applications - Sites at Penn State, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://sites.psu.edu/simtech/dielectric-constant-of-polar-liquids-using-md-simulations/>
3. Dielectric Polarization in Polar and Nonpolar Material - BYJU'S, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://byjus.com/physics/dielectric-polarization-in-polar-and-nonpolar-material-and-dielectric-constant/>
4. Polarizability - Wikipedia, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://en.wikipedia.org/wiki/Polarizability>
5. Electronic continuum model for molecular dynamics simulations - PMC, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC3910273/>
6. The Interplay between Dynamics and Structure on the Dielectric Tensor of Nanoconfined Water: Surface Charge and Salinity Effect - PMC, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11613631/>
7. Static Dielectric Constant from Simulations Revisited: Fluctuations or ..., 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26580363/>
8. Statistical Error in Particle Simulations of Low Mach Number Flows - DSpace@MIT, 8月 27, 2025にアクセス、 <http://dspace.mit.edu/bitstream/handle/1721.1/4017/HPCES026.pdf?sequence=2>
9. Dielectric Properties of Liquid Phase Molecular Clusters using External Field Method: Molecular Dynamics Study - ResearchGate, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://www.researchgate.net/publication/262913385_Dielectric_Properties_of_Liquid_Phase_Molecular_Clusters_using_External_Field_Method_Molecular_Dynamics_Study>
10. Static Dielectric Constant from Simulations Revisited: Fluctuations or External Field? | Journal of Chemical Theory and Computation, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct500025m>
11. pubs.aip.org, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubs.aip.org/aip/jcp/article/161/4/044505/3304404/Accuracy-limit-of-non-polarizable-four-point-water#:~:text=The%20dipole%20moment%20%CE%BC%20of,a%20correct%20description%20of%20G.>
12. Accounting for electronic polarization in non- polarizable force fields - arXiv, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://arxiv.org/pdf/1505.04576>
13. (PDF) Effect of the Dielectric Constant on the Solubility of Acetone in ..., 8月 27, 2025にアクセス、 <https://www.researchgate.net/publication/324511848_Effect_of_the_Dielectric_Constant_on_the_Solubility_of_Acetone_in_Water>
14. Force fields for small molecules - PMC, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC6733265/>
15. Polarizable force fields Thomas A Halgren\* and Wolfgang Damm, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://homes.nano.aau.dk/fp/md/Polarizable%20force%20fields.pdf>
16. Understanding the Dielectric Properties of Liquid Amides from a Polarizable Force Field | The Journal of Physical Chemistry B - ACS Publications, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp709729d>
17. Dielectric Constant, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://macro.lsu.edu/howto/solvents/Dielectric%20Constant%20.htm>
18. Implementing the Drude Polarizable Force Field in NAMD - Theoretical and Computational Biophysics Group, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://www.ks.uiuc.edu/Research/Drude/>
19. High-Performance Scalable Molecular Dynamics Simulations of a Polarizable Force Field Based on Classical Drude Oscillators in NAMD | The Journal of Physical Chemistry Letters - ACS Publications, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jz101461d>
20. Polarizable Mean-Field Model of Water for Biological Simulations with Amber and Charmm force fields - PMC, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC4285689/>
21. Electronic continuum model for molecular dynamics simulations - PubMed, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/19256627/>
22. 周期境界密度汎関数法による 高分子結晶の構造解析と物性評価 - OPAC, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://opac.ll.chiba-u.jp/da/curator/106419/TLA_0316.pdf>
23. GROMACSのPBC周りのもろもろ - Zenn, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://zenn.dev/kh01734/articles/012380a58949d1>
24. Periodic boundary conditions - GROMACS 2025.2 documentation, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://manual.gromacs.org/current/reference-manual/algorithms/periodic-boundary-conditions.html>
25. Electric fields - GROMACS 2025.2 documentation, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://manual.gromacs.org/documentation/current/reference-manual/special/electric-fields.html>
26. A Method to Determine Dielectric Constants in Nonhomogeneous Systems: Application to Biological Membranes - PubMed Central, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC2212679/>
27. The Implementation of Slab Geometry for Membrane-Channel Molecular Dynamics Simulations | Request PDF - ResearchGate, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://www.researchgate.net/publication/10689084_The_Implementation_of_Slab_Geometry_for_Membrane-Channel_Molecular_Dynamics_Simulations>
28. Slab-Geometry Molecular Dynamics Simulations: Development and Application to Calculation of Activity Coefficients, Interfacial Electrochemistry, and Ion Channel Transport - BYU ScholarsArchive, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://scholarsarchive.byu.edu/etd/2/>
29. Computing dielectric spectra in molecular dynamics simulations: using a cavity to disentangle self and cross correlations - arXiv, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://arxiv.org/pdf/2507.04908>
30. Dielectric Properties of Organic Solvents in an Electric Field | Request PDF - ResearchGate, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://www.researchgate.net/publication/311691480_Dielectric_Properties_of_Organic_Solvents_in_an_Electric_Field>
31. A rationale for non-linear responses to strong electric fields in ..., 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2022/cp/d1cp04466d>
32. Local Field Factors and Dielectric Properties of Liquid Benzene ..., 8月 27, 2025にアクセス、 <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcb.5b07043>
33. dielectric command - LAMMPS documentation, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://docs.lammps.org/dielectric.html>
34. Molecular dynamics simulation of microwave heating of liquid monoethanolamine (MEA): an evaluation of existing force fields - Edinburgh Research Explorer, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://www.research.ed.ac.uk/files/63753048/pdf_archiveJCPSA6vol_148iss_20204513_1_am.pdf>
35. Molecular dynamics simulation with finite electric fields using Perturbed Neural Network Potentials - arXiv, 8月 27, 2025にアクセス、 <https://arxiv.org/html/2403.12319v1>