# 目　次

はじめに

1　計算化学で何ができるか ―――― 1

1.1　計算機シミュレーション ・・・・・・・・・・・・ 1
――計算機シミュレーションとは

1.2　計算化学とは ・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 3
――ミクロからマクロまで・分子から集合体の性質まで

1.3　計算化学的計算機シミュレーション技法・・・・ 5
――分子軌道法，分子動力学法，物性推算法

1.4　計算化学的計算機シミュレーションを
ささえる情報技術 ・・・・・・・・・・・・・・・・・ 9
――もっと速い計算機システムを

2　分子軌道法 ―――― 11

2.1　ハートリー-フォック法の概要 ・・・・・・・・・ 12

2.2　基底関数とその選び方 ・・・・・・・・・・・・・ 20

2.3　実際の SCF 計算の手続き ・・・・・・・・・・・・ 22

2.4　分子軌道計算における計算精度の問題・・・・・ 23

(a)　なぜ計算精度が必要か ・・・・・・・・・・・・・ 24

(b)　全エネルギー値と要求計算精度 ・・・・・・・・・ 25

(c)　分子軌道法における計算誤差の見積り ・・・・・ 27

(d)　固有値計算(対角化)における誤差 ・・・・・・・ 34

2.5　分子軌道法の高速計算 ・・・・・・・・・・・・・ 37

(a)　分子積分のカットオフによる演算量と
メモリ量の削減 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 39
(b)　並列分散フォック行列アルゴリズムとの関係 ・・ 41
(c)　分散並列処理に適したフォック行列生成
アルゴリズム ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 46
(d)　転送する行列情報がメモリに入りきらない場合 ・ 61
(e)　ホスト計算機での計算 ・・・・・・・・・・・・・ 63
(f)　大規模計算におけるカットオフの実例 ・・・・・ 65

3　分子動力学法―――――――――――――――――― 75

3.1　古典分子動力学シミュレーションの概要・・・・ 75
3.2　初期構造と初期速度 ・・・・・・・・・・・・・・ 76
(a)　初期構造 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 76
(b)　境界条件と溶媒の扱い方 ・・・・・・・・・・・ 77
(c)　エネルギー極小化 ・・・・・・・・・・・・・・・ 80
(d)　初期速度 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 81
(e)　その他 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 82
3.3　力とポテンシャルの計算 ・・・・・・・・・・・ 83
(a)　共有結合力 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 85
(b)　結合角 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 85
(c)　ねじれ角 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 85
(d)　ファン・デル・ワールス力および水素結合 ・・・ 87
(e)　クーロン力 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 88
(f)　1-4 非共有結合力 ・・・・・・・・・・・・・・・ 94
(g)　排除原子の扱い方 ・・・・・・・・・・・・・・・ 94
3.4　時間積分・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 95
(a)　速度 Verlet 法 ・・・・・・・・・・・・・・・・・ 95
(b)　多時間刻み幅法 RESPA ・・・・・・・・・・・・・ 96

3.5　アンサンブル　・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・98
(a)　ミクロカノニカルアンサンブル
(NVE アンサンブル)　・・・・・・・・・・・・・・・・・98
(b)　ウッドコック法(NVT アンサンブル)　・・・・・・・99
(c)　能勢-フーバー法・・・・・・・・・・・・・・・・・・99
3.6　トラジェクトリの解析方法　・・・・・・・・・・・101
(a)　エネルギーに関する物理量　・・・・・・・・・・・102
(b)　分子構造とダイナミクス　・・・・・・・・・・・・103

4　物性推算法———111

4.1　物性推算法の現状　・・・・・・・・・・・・・・・・115
4.2　物性推算法の分類　・・・・・・・・・・・・・・・・116
4.3　ニューラルネットによる化学物質の
物性推算・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・118
(a)　ニューラルネットワーク　・・・・・・・・・・・・120
(b)　ニューラルネットワークによる分子の構造予測　・122
4.4　再構築学習法による特徴抽出の方法・・・・・・・127
(a)　再構築学習法　・・・・・・・・・・・・・・・・・・127
(b)　ニューラルネットワークによる炭素鋼の
物性推算　・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・131
4.5　ニューラルネットワークによる物質の
物性推算の可能性　・・・・・・・・・・・・・・・・・・140

さらに勉強するために・・・・・・・・・・・・・・・・・・143

索　引　・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・147