

ブルームーンアンサンブル法の実装

古明地勇人

産業技術総合研究所
〒305-8568 つくば市産総研つくば中央第2

*E-mail: y-komeiji@aist.go.jp

要旨

ブルームーンアンサンブル法 (Carter et al., 1989, *Chem. Phys. Lett.* **156**, 472; Sprik & Ciccotti, 1998, *J. Chem. Phys.* **109**, 7737)は、指定された反応座標に沿って、自由エネルギー変化を計算する方法の一種である。ここでは、「粒子間距離」および「粒子間距離の差」を反応座標に取る場合についてブルームーン法のアルゴリズムを導出した。アルゴリズムの実装は、任意のプログラムに実装可能なように、フォートラン様の擬似コードを用いて説明した。

キーワード:ブルームーン、自由エネルギー、平均力ポテンシャル、拘束分子動力学、PEACH

領域区分: 分子計算