

## 分子動力学シミュレーションの基礎

奥村久士 (分子研, 総研大)

分子動力学シミュレーションは物理学, 化学, 機械工学など広い分野で応用されています。また実験研究においても分子動力学シミュレーションの結果と比較することはよく行われています。そこで今回の講義では分子動力学シミュレーションについて基礎から学びます。時間の都合で多少の変更があるかもしれませんが, 以下のような内容を予定しています。この講義を聞いていただければ, 自分で分子動力学シミュレーションのプログラムを書いて研究を始められるように計画してあります。本講義で学んだ知識が皆様の研究の発展に少しでも役立てば幸いです。皆様の参加をお待ちしています。

### 第1章 解析力学

- 1.1 ラグランジュ形式
- 1.2 ハミルトン形式

### 第2章 統計力学

- 2.1 統計力学の原理
- 2.2 熱力学量の計算の仕方

### 第3章 分子動力学シミュレーションの基礎

### 第4章 時間発展

- 4.1 ベルレ法
- 4.2 ベルレ法によるエネルギーの誤差
- 4.3 ギアの予測子・修正子法

### 第5章 速度スケーリング法による温度制御

### 第6章 拡張系の方法による温度・圧力制御

- 6.1 温度一定 拡張系の方法 (能勢の方法)
- 6.2 圧力一定 拡張系の方法 (アンダーセンの方法)
- 6.3 温度・圧力一定 拡張系の方法 (能勢・アンダーセンの方法)
- 6.4 パリネロ・ラーマンの方法

## 分布関数を用いた熱力学量の計算

横川大輔 (大阪大, JSPS)

分布関数という言葉聞いたときに、  
どのようなものをイメージされるで  
しょうか？

動径分布関数やエネルギーのヒストグラムをイメージされた方はかなり分布関数通だと思います。しかし多くの人にとっては、この分布関数は特にイメージするものがないほど影の薄い存在かもしれません。

それでは、この分布関数は重要ではない関数なのでしょうか。

私はそうではないと考えています。

なぜなら分布関数は豊富な情報を含んでいて、そこから様々な熱力学量を計算することができるからです。これまで私はこの分布関数の特徴を利用した研究を進めてきました。

本講義では、この分布関数を利用した熱力学量計算について解説していきたいと思っています。そこでは、ただ式変形を追いかけるのではなく、私がなぜ分布関数に着目して研究してきたのかについても理解して頂けるように進めていきたいと考えています。