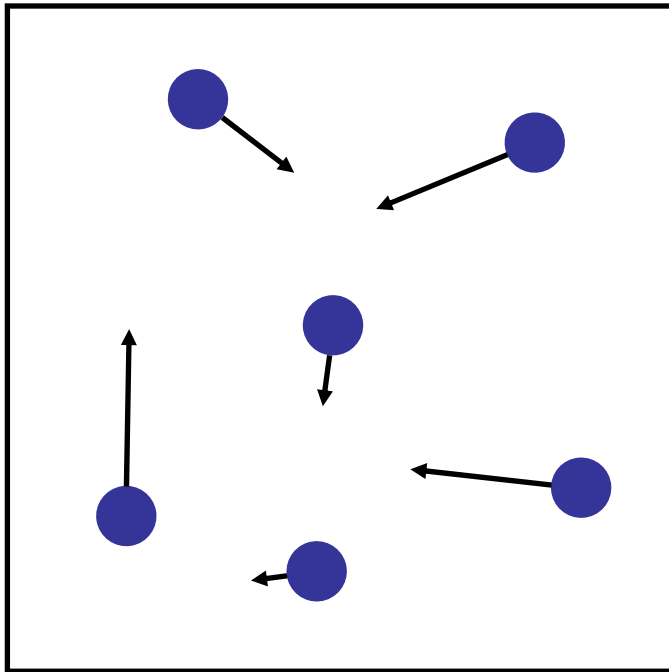


分子科学研究所 夏の体験入学

計算科学研究センター
奥村グループ

「分子動力学シミュレーションを学び体験する」

分子動力学シミュレーションとは



1. 初期条件を与える

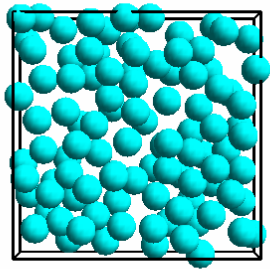
$$\begin{cases} \text{座標} & \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N \\ \text{速度} & \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N \end{cases}$$

2. ニュートン方程式に基づいて分子を動かす

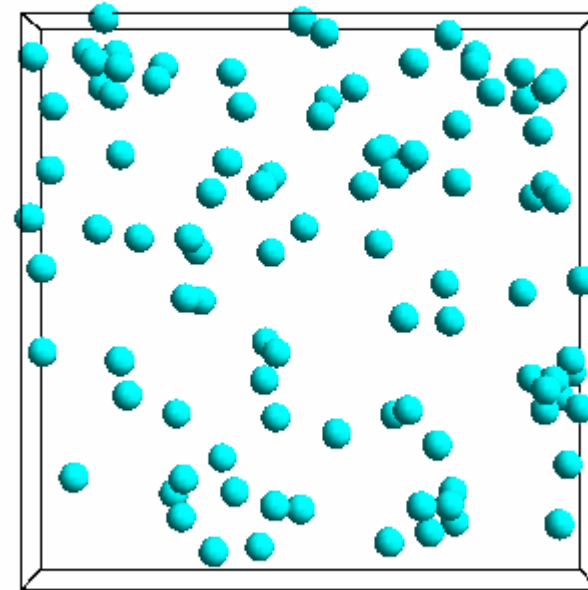
$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i / m_i$$

応用例 蒸発：液体から気体への相転移

液体
密度 高い



気体
密度 低い



分子が動く様子をコンピューターを使って見てみよう

体験入学のプログラム

1. 分子動力学シミュレーションを学ぶ
解析力学、統計力学を復習する
分子動力学法の基礎を学ぶ
温度、圧力の制御法を学ぶ
2. 分子動力学シミュレーションを体験する
プログラミング実習
相転移現象に応用する
3. 研究の最前線
最近の研究成果について紹介します