

## 2026 年度シラバス

| 科目分類/Subject Categories |   |                    |                    |
|-------------------------|---|--------------------|--------------------|
| 学部等/Faculty             | /工芸科学部 : /School of Science and Technology  | 今年度開講/Availability | /有 : /Available    |
| 学域等/Field               | /物質・材料科学域 : /Academic Field of Materials Science                                      | 年次/Year            | /3年次 : /3rd Year   |
| 課程等/Program             | /応用化学課程・課程専門科目 : /Specialized Subjects for Undergraduate Program of Applied Chemistry | 学期/Semester        | /前学期 : /First term |
| 分類/Category             | /:/   | 曜日時限/Day & Period  | /金 3 : /Fri.3      |

| 科目情報/Course Information     |                                     |                   |                                 |                               |
|-----------------------------|-------------------------------------|-------------------|---------------------------------|-------------------------------|
| 時間割番号<br>/Timetable Number  | 11414301                            |                   |                                 |                               |
| 科目番号<br>/Course Number      | 11460019                            |                   |                                 |                               |
| 単位数/Credits                 | 2                                   |                   |                                 |                               |
| 授業形態<br>/Course Type        | 講義 : Lecture                        |                   |                                 |                               |
| クラス/Class                   |                                     |                   |                                 |                               |
| 授業科目名<br>/Course Title      | シミュレーション物理学 : Simulational Physics  |                   |                                 |                               |
| 担当教員名<br>/ Instructor(s)    | /藤原 進 : FUJIWARA Susumu             |                   |                                 |                               |
| その他/Other                   | インターンシップ実施科目 Internship             | 国際科学技術コース提供科目 IGP | PBL 実施科目 Project Based Learning | DX 活用科目 ICT Usage in Learning |
|                             |                                     |                   |                                 | ○                             |
|                             | 実務経験のある教員による科目<br>Practical Teacher |                   |                                 |                               |
| 科目ナンバリング<br>/Numbering Code |                                     |                   |                                 |                               |

| 授業の目的・概要 Objectives and Outline of the Course |  |
|---|--|
| 日   | コンピュータ・シミュレーションは、解析的手法では扱うことのできない複雑な系の性質を研究する手段として、科学の多くの分野で用いられるようになってきた。コンピュータ・シミュレーションの方法には、大きく分けて決定論的方法と確率論的方法の二つの方法がある。本講義では、決定論的方法である分子動力学シミュレーション手法について、その数学的・物理学的基礎および基本原理の解説を行う。  |
| 英   | Computer simulation has been utilized in many fields of science as a means to study the properties of the complex systems which cannot be treated by analytical methods. Computer simulation methods are mainly classified into two categories: deterministic methods and stochastic methods. The object of this lecture is to explain the mathematical and physical bases and the fundamental principles of a molecular dynamics simulation method which is one of the deterministic methods. |

| 学習の到達目標 Learning Objectives |   |
|-----------------------------|---|
| 日                           | 分子動力学シミュレーションの概要を理解する。<br>分子間ポテンシャルの概要を理解する。<br>静的・動的性質を表す物理量の概要を理解する。  |
| 英                           | To understand the overview of molecular dynamics simulation.<br>To understand the overview of the intermolecular potentials.<br>To understand the overview of physical quantities representing static and dynamic properties. |

| 学習目標の達成度の評価基準 / Fulfillment of Course Goals (JABEE 関連科目のみ) |  |
|--|--|
| 日  |  |

| 英                  |   |  |  |
|--------------------|---|--|--|
| 授業計画項目 Course Plan |   |  |  |
| No.                |   | 項目 Topics  | 内容 Content   |
| 1                  | 日 | コンピュータ・シミュレーションとは何か (1)                                | コンピュータ・シミュレーションの役割   |
|                    | 英 | What is computer simulation? (1)                       | The role of computer simulation.   |
| 2                  | 日 | コンピュータ・シミュレーションとは何か (2)                                | 簡単な例: 1次元調和振動子、コンピュータのなかの物質系   |
|                    | 英 | What is computer simulation? (2)                       | The simple examples: The one-dimensional harmonic oscillator and the substance systems in silico.  |
| 3                  | 日 | コンピュータ・シミュレーションとは何か (3)                                | 分子動力学シミュレーション研究の進め方 (1): 基本的な手順  |
|                    | 英 | What is computer simulation? (3)                       | How to proceed with the molecular dynamics simulation study (1): Fundamental procedures.   |
| 4                  | 日 | コンピュータ・シミュレーションとは何か (4)                                | 分子動力学シミュレーション研究の進め方 (2): 初期条件 (1)  |
|                    | 英 | What is computer simulation? (4)                       | How to proceed with the molecular dynamics simulation study (2): Initial conditions (1).   |
| 5                  | 日 | コンピュータ・シミュレーションとは何か (5)                                | 分子動力学シミュレーション研究の進め方 (3): 初期条件 (2)  |
|                    | 英 | What is computer simulation? (5)                       | What is computer simulation? (5)   |
| 6                  | 日 | コンピュータ・シミュレーションとは何か (6)                                | 分子動力学シミュレーション研究の進め方 (4): 境界条件、無次元化   |
|                    | 英 | What is computer simulation? (6)                       | How to proceed with the molecular dynamics simulation study (4): Boundary conditions. Nondimensionalization.   |
| 7                  | 日 | 分子間ポテンシャル  | 力の起源、多体相互作用の二体相互作用への還元、相互作用モデルとポテンシャル関数、汎用ポテンシャル   |
|                    | 英 | Intermolecular potentials                              | The origin of forces. The reduction of a many-body interaction to a two-body interaction. The interaction model and the potential functions. The general-purpose potentials. |
| 8                  | 日 | 前半のまとめ   | 前半のまとめと演習 (授業項目 1~7) の実施   |
|                    | 英 | Summary of the first half                              | Summary of the first half and conduct of exercises (Topics 1-7).   |
| 9                  | 日 | 数値計算の解法  | 差分近似法  |
|                    | 英 | Numerical calculation method                           | The general-purpose potentials.  |
| 10                 | 日 | コンピュータを用いた実習   | 1次元調和振動子系の数値計算、単原子分子系の分子動力学シミュレーション  |
|                    | 英 | Computer-based practice                                | Numerical calculation of the one-dimensional harmonic oscillator system. Molecular dynamics simulation of monatomic systems.   |
| 11                 | 日 | 静的性質を表す物理量 (1)   | MD 計算における"平均"の意味、熱力学量  |
|                    | 英 | Physical quantities representing static properties (1) | The meaning of "average" in the molecular dynamics calculation. Thermodynamic quantities.  |
| 12                 | 日 | 静的性質を表す物理量 (2)   | 動径分布関数   |
|                    | 英 | Physical quantities representing static properties (2) | The radial distribution function.  |
| 13                 | 日 | 静的性質を表す物理量 (3)   | 静的構造因子   |
|                    | 英 | Physical quantities representing static properties (3) | The static structure factor.   |
| 14                 | 日 | 静的性質を表す物理量 (4)   | エネルギー・圧力の補正  |

|    |   |  |  |
|----|---|--|--|
|    | 英 | Physical quantities representing static properties (4) | The correction of the energy and pressure.   |
| 15 | 日 | 動的性質を表す物理量   | 自己拡散係数、速度自己相関関数、グリーン・久保形式  |
|    | 英 | Physical quantities representing dynamic properties    | The self-diffusion coefficient. The velocity autocorrelation function. Green-Kubo formula. |

| 履修条件 Prerequisite(s) |   |
|----------------------|---|
| 日                    | この科目を履修するには、基礎解析Ⅰ、基礎解析Ⅱ、線形代数Ⅰ、線形代数Ⅱのうちから、1科目以上の単位を取得していることが必要である。   |
| 英                    | This class requires the acquisition of units for at least one subject out of "Basic Calculus I", "Basic Calculus II", "Linear Algebra I" and "Linear Algebra II". |

| 授業時間外学習（予習・復習等）<br>Required study time, Preparation and review |  |
|--|--|
| 日  | 物理学の基礎知識（力学、電磁気学、統計力学）を修得していることを前提として講義する。各授業に対し、講義内容に関する予習を1時間、復習を2時間、合わせて3時間の予習・復習に加え、演習や課題、定期試験に備えるための学習時間を要する。   |
| 英  | This class requires the understanding of mechanics, electromagnetics and statistical mechanics. This class requires not only one hour to prepare for the individual classes and two hours for review (three hours in total) but also further learning hours to prepare for exercise, assignment and regular examination. |

| 教科書／参考書 Textbooks/Reference Books |  |
|-----------------------------------|--|
| 日                                 | ・参考書「分子動力学シミュレーションの基礎理論」（松林 伸幸 編、東京化学同人）   |
| 英                                 | For a reference: "Fundamental Theory of Molecular Dynamics Simulations" (edited by N. Matsubayashi, Tokyo Kagaku Dozin Co.,Ltd). |

| 成績評価の方法及び基準 Grading Policy |  |
|----------------------------|--|
| 日                          | 期末試験の成績で評価する。  |
| 英                          | Evaluation is conducted based on the results of the term-end exam. |

| 留意事項等 Point to consider |  |
|-------------------------|--|
| 日                       | 講義は原則対面式で行うが、必要に応じて、一部の授業回を非同期オンライン（オンデマンド）授業で実施する。  |
| 英                       | In principle, lectures will be conducted face-to-face, but some class sessions will be conducted asynchronously online (on-demand) when necessary. |