

科目コード／科目名 (Course Code / Course Title)	CC106／分子動力学論 (Molecular Dynamics Theory)		
テーマ／サブタイトル等 (Theme / Subtitle)	分子動力学シミュレーション入門		
担当者名 (Instructor)	古明地 勇人(KOMEIJI YUUTO)		
学期 (Semester)	秋学期(Fall Semester)	単位 (Credit)	2単位(2 Credits)
科目ナンバリング (Course Number)	CHE3610	言語 (Language)	日本語 (Japanese)
備考 (Notes)			

授業の目標(Course Objectives)

分子の構造・物性・機能を理解するため重要な方法の一つである、分子動力学シミュレーション法について、その原理・実行方法・応用を学習する。

This course will discuss molecular dynamics simulation (MD), an important computational method of determining a molecule's structure, properties, and functions. The students will learn how to perform MD simulations, as well as the theory behind them and their potential applications.

授業の内容(Course Contents)

分子動力学(Molecular dynamics, MD)法は、分子シミュレーション法の一つである。MD法では、分子あるいは分子集合体の構成原子に掛かる力を計算しながら、運動方程式を時々刻々解いて、その分子系の時間発展を記述し、そこから、分子系の安定構造、動的構造、エネルギー状態などを議論することができる。MD法は、水、液晶、タンパク質、DNAなど、様々な物質の解析に用いられている。この授業では、MD法の原理、アルゴリズム、実行方法を学びながら、その応用事例にも触れる。古典力学に基づいた古典MD法を中心に講義するが、最後に量子力学に基づいた第一原理MD法も紹介する。

講義中、実際にシミュレーション計算をなどを行うことが多く、「実習」に近い科目であるので、毎回出席し、レポートを提出すること。最後に、理解度を試すテストを行う。

The molecular dynamics (MD) simulation is a computational method to simulate dynamical behaviors of molecules. In MD, the forces acting upon component atoms of molecules are calculated and used to calculate their motion in real time. The MD method is applied to a wide variety of substances including water, liquid crystals, proteins, DNA, and so on, to give conjectures as to their stable structure, their dynamic structure, and their energy state. In this class, students will be taught how to perform MD simulation. In addition, the theory and algorithms behind it, as well as its practical applications, will be discussed. This lecture will mostly focus on the classical MD method, which is based on classical mechanics; however, the ab initio MD method based on quantum mechanics will also be introduced briefly. During the lectures, simulation calculations will often be run. Practice makes perfect in this subject; as such, good attendance and punctual report submissions are a must. Students will be required to take a test to gauge their level of understanding at the end.

授業計画(Course Schedule)

1. 講義の概要と分子動力学概論
2. 古典力学の復習
3. 時間積分(前)
4. 時間積分(後)
5. 境界条件と初期構造／力とエネルギーの計算(前)
6. 力とエネルギーの計算(後)／アンサンブル
7. * 結果の解析／古典分子動力学実習・準備
8. * 古典分子動力学法実習(前)
9. * 古典分子動力学法実習(中)
10. * 古典分子動力学法実習(後)
11. 古典分子動力学法の応用(前)
12. 古典分子動力学法の応用(後)
13. 第一原理分子動力学法
14. 最終テスト

授業時間外(予習・復習等)の学習(Study Required Outside of Class)

ほぼ毎回の課題レポートが、講義の予習・復習になるので、必ず提出すること。講義は、高校と大学教養レベルの数学、物理学、情報科学(計算機プログラミング)、化学、生物学の知識を前提として行うので、足りない部分は適宜自習して補うこと。

Be sure to submit each assignment report, as it will serve as preparation and review for the lecture. The lecture assumes

knowledge of math, physics, informatics (computer programming), chemistry, and biology at the high school and college liberal arts level; hence, any knowledge that is lacking should be supplemented by self-study.

成績評価方法・基準 (Evaluation)

ほぼ毎回のレポート(50%)/出席態度(20%)/最終テスト(Final Test)(30%)

授業計画で*をつけた4回は、出席しない場合はレポート点も0点になるので、注意。また、未提出レポートが3件以上の学生は、自動的にD判定(不可)。

テキスト(Textbooks)

なし

参考文献 (Readings)

1. 金田行雄・笹井理生、2010、『分子システムの計算科学』、共立出版 (ISBN:4320122712)
2. 岡崎進・吉井範行、2011、『コンピュータ・シミュレーションの基礎第2版』、化学同人 (ISBN:4759814752)

その他(HP等) (Others(e.g.HP))

注意事項 (Notice)