

計算物性物理学（担当：樋渡保秋）

1. 序

計算機を道具として積極的に用いたいわゆる Computer Aided Science は自然科学のあらゆる分野において重要な役割を果たしている。本講義は、物性物理学のいくつかの専門分野で分子動力学（MD）法やモンテカルロ（MC）法の計算機シミュレーションがどのように用いられているかについて紹介する。本講義の意図するところは単に個々の計算例を紹介だけではない。計算機シミュレーションによる物性研究には従来の純理論や実験による研究にない利点が数多くある。本講義で計算機シミュレーションを用いた物性物理学研究の最前線についてお話することの他にこの方法が新しい物理（質）観の構築にどのように役立っているか、また将来における可能性についても触れていきたい。

授業では計算機シミュレーションの技法（プログラムの作り方など）についてはほとんどお話できないと思います。従って、計算プログラムの作り方に関する知識については別途に各自で勉強されることをお勧めする。

本講義では最初に計算物理学の歴史（研究の流れ）について概括した後で、現在最も関心が高い「複雑系の物理」についての計算物機シミュレーションの幾つかのトピックスを学ぶ。これらを通じて、シミュレーションの種々の方法と利点、最先端物性研究での位置付けを学ぶとともに今後の計算物理学のさらなる発展のための諸条件についても考察する。

2. 分子動力学法を用いた複雑系の研究

（The Fifteenth Japan Symposium on Thermophysical Properties 1994 参照）

3. 水・氷の相転移のMD

4. フラレン分子の分裂と形成のMD

（The Journal of Physical Chemistry, Vol.96, No.9, 1992, 3565 参照）

5. 脂質二重膜のMD

（Chemical Physics Letters 232 (1995) 308-322 参照）

6. 電子を含む系のMD

7. 計算科学の現状と将来