固体材料の強度と物性評価のための

分子動力学法入門

梅野　宜崇 著

コロナ社

ま　え　が　き

分子動力学法（molecular dynamics; MD）は，原子一つひとつに対する運動方程式を考え，その運動の軌跡を数値計算によって求めるシミュレーション法である。各原子についてのニュートンの運動方程式を解くという，ある意味非常にシンプルな手法であり，もともとは液体における分子の振舞いを再現するためのシミュレーションとして用いられたが，1990 年代以降は固体材料の強度問題や物性評価にも積極的に取り入れられるようになった。扱えるモデルのサイズなどに強い制限があるため，当初はよくいえば先進的な取組み，悪くいえば現実離れした役に立たないシミュレーション研究ととらえられた節もあった。しかしながら，その後の計算機能力の飛躍的な進歩に伴い，その有効性が徐々に認められるようになってきたといえる。

地球シミュレータ，京，富岳といったスーパーコンピュータ（スパコン）の名前は，専門家でなくとも耳にするようになり，その存在と発展は広く耳目を集めるようになった。そうした世界トップレベルのスパコンで行われる超大規模計算シミュレーションは，新聞などでもたびたび取り上げられ，世間を驚かせている。一方，研究室レベルで準備できるような中規模な並列計算環境でも，かなりの大規模計算が行えるようになり，一昔前までは考えられなかった計算が可能となってきている。

それでも，工業製品の機械的性能（例えば荷重に対する耐久性など）を直接評価するような，製品開発に直結するようなシミュレーションを分子動力学法で行うことは，いまだに簡単ではないのは事実である。どちらかといえば，開発現場において生じる問題について，そのメカニズム（原子レベルでなにが起こっているのか）をまずは明らかにしたいというような，いわゆるサイエンスの探求のために用いられる手法という側面が強いのが現状である。

しかしながら，原子や分子の動的挙動を直接（シミュレーションであるため，あくまで疑似的にではあるが）観察できるという点は，分子動力学法の大きな強みであり，それによってこそ得られる知見は非常に多いといえる。今後，さらなる計算機能力の向上が見込まれているだけでなく，機械学習・深層学習などを援用した新たな手法の開発も進められるなど，方法論的な進展にも注目すべきものがある。そのため将来的には，より実際的な問題へ適用範囲が広がっていき，工業的にもその重要性が大きく高まっていくものと期待される。現在，FEM（finite element method; 有限要素法）を用いた応力解析や熱・流体シミュレーションは，製品設計の現場においても広く使用されており，今や工業製品開発のために欠かせないツールとなっているが，分子動力学法によるシミュレーションがそのような地位を占めるようになる時代が，やがてやってくるかもしれない。

分子動力学法について解説した教科書は，これまでも数多く出版されてきたが，同手法はもともと液体や気体への適用によって発展してきたという背景もあり，液体・気体系に対するシミュレーションを念頭に書かれた本が多い。特に，分子動力学法による固体材料の機械的特性評価を対象として書かれた本はまだ少なく，そのようなシミュレーションに興味のある初学者のための情報は，十分に整理されているとはいえない。

そこで本書では，固体材料の強度や物性評価を行うことを前提として，分子動力学法の基礎理論と基本的手法について解説することを目的とした。このようなシミュレーションに興味のある工学系の大学院生・若手研究者を，読者層の中心として想定している。固体の機械的特性に関する基礎知識があれば，本書の内容は学習しやすいと思われる。ただ，可能なかぎり予備知識は必要ないように，初学者に配慮しながら書いたつもりであるので，意欲のある学部生や，分野外の方にもぜひ手に取っていただければ幸甚である。

第 1 章では，分子動力学法の歴史を概観するとともに，固体材料の強度・物性評価における位置づけについて述べ，分子動力学法の長所と短所を解説した。また，いったいなんのためにシミュレーションを行うのか，という点はつねに

考えていただきたいという思いから，シミュレーションというアプローチに対する考え方についても議論を深めた。

第 2 章では，分子動力学法の基礎理論について，できるだけ噛み砕きわかりやすく述べた。固体材料に対する変形シミュレーションを行うことを想定して，そのようなケースによく用いられる構造緩和の手法や，大規模系に適した長距離クーロン相互作用の処理など，他書ではあまり触れられない項目についてもカバーした。また第 3 章では，分子動力学法の肝ともいえる，原子間ポテンシャルについて解説した。固体材料のシミュレーションによく用いられてきたポテンシャルについては，具体的な関数形を示し，一部の有名なものはパラメータも記載した。原子周りの電子分極や電荷移動，化学反応を扱えるような複雑なポテンシャル，さらには最近のトレンドである機械学習ポテンシャルについても紹介したが，複雑になりすぎるものについては関数形の表示は割愛し，コンセプトの解説にとどめた。

第 4 章では，固体材料に対する強度・物性評価としてよく行われるものを取り上げ，その具体的な方法や注意点について解説した。応力や表面エネルギーといった，一般に（分野を問わず）広く評価される物性値だけでなく，固体の強度問題を議論する際に重要な評価法を紹介している。

本書のもう一つの特色は，第 5 章において，比較的簡単な分子動力学プログラムを書くための演習を用意したことである。著者の個人的な経験から，シミュレーション手法の概要を理解するために最も手っ取り早い方法は，実際にプログラムを書いてみることであると思われる。第 5 章では，まず非常に簡単なプログラムを書き，それに少しずつ拡張を加え機能をつけ足していくという形式で，最終的にはナノ材料の変形シミュレーションが行えるプログラムを完成させるようになっている。プログラミングの経験が豊富でない読者でも理解できるようにつとめたつもりなので，ぜひトライしていただきたい。なお，第 5 章で紹介したプログラムなどは，著者の GitHub リポジトリにて公開している†。

† https://github.com/yoshiumeno/MD_introduction_coronasha/

また，本題からはやや外れるが，シミュレーションにまつわる四方山(よもやま)話をコーヒーブレイクとしていくつか盛り込んだ。著者の私見がかなり入っている部分もあり，必ずしも共感いただけるとは思っていないが，肩の力を抜いてお読みいただければ幸いである（もちろん，読み飛ばしていただいても支障はない）。

本書の刊行にあたり，株式会社コロナ社の担当者には，企画の段階から貴重なご意見を賜り，原稿について細部までのチェックと適切なご助言をいただいた。また，研究室の若本達哉氏，谷村瞭氏には原稿の試読に加え，第 5 章のプログラムについて詳細なご指摘をいただいた。皆様のご協力に，心より感謝を申し上げたい。

2025 年 10 月

梅野宜崇

目　　次

1.　分子動力学法とは

1.1　分子動力学法の概要と歴史 …… 1

1.2　材料強度物性評価における分子動力学法の位置づけ …… 4

1.2.1　分子動力学法の長所と短所 …… 4

1.2.2　モデリングなのか，数値実験なのか …… 6

1.3　汎用ソフトウェア …… 7

2.　分子動力学法の基礎

2.1　原子に働く力とポテンシャル関数 …… 10

2.2　運動方程式と数値積分 …… 12

2.2.1　Verlet 法 …… 12

2.2.2　速 度 Verlet 法 …… 14

2.2.3　Gear の予測子・修正子法 …… 14

2.3　周期系における計算 …… 17

2.3.1　周 期 境 界 条 件 …… 17

2.3.2　カットオフ距離 …… 19

2.3.3　bookkeeping（粒子登録）法 …… 20

2.3.4　領域分割（セルインデックス）法 …… 21

2.4　アンサンブルと温度・応力制御 …… 21

2.4.1　速度スケーリング法による温度制御 …… 22

2.4.2　Nosé-Hoover 法による温度制御 …… 22

2.4.3　圧力（応力）制御法 …… 24

2.4.4 圧力・温度制御法 …… 28
2.4.5 拡張系 MD における仮想質量設定 …… 29
2.5 構造緩和計算 …… 30
2.5.1 BFGS 法 …… 31
2.5.2 gloc …… 34
2.5.3 FIRE …… 34
2.6 ポテンシャル計算に関連する手法 …… 36
2.6.1 クーロンエネルギーの計算法 …… 36
2.6.2 カットオフの取扱い …… 40
コーヒーブレイク：シミュレーションの「地位」 …… 41

3. 原子間ポテンシャル

3.1 2 体間ポテンシャル …… 44
3.1.1 Morse ポテンシャル …… 45
3.1.2 LJ ポテンシャル …… 45
3.1.3 Buckingham ポテンシャル …… 46
3.1.4 BMH ポテンシャル …… 46
3.1.5 2 体間ポテンシャルの問題点 …… 47
3.2 3 体間ポテンシャル …… 47
3.2.1 SW ポテンシャル …… 48
3.2.2 Tersoff ポテンシャル …… 49
3.3 多体ポテンシャル …… 52
3.3.1 EAM（原子挿入法）ポテンシャル …… 52
3.3.2 MEAM ポテンシャル …… 58
3.3.3 ADP …… 60
3.4 ボンドオーダーポテンシャル（BOP） …… 63
3.4.1 EDIP …… 64
3.4.2 Brenner（REBO）ポテンシャル …… 65
3.5 より複雑なポテンシャル …… 68
3.5.1 シェルモデル・ダイポールモデル …… 68

3.5.2　電荷移動ポテンシャル・反応力場（ReaxFF） …… 71
3.5.3　機械学習ポテンシャル …… 72
コーヒーブレイク：機械学習ポテンシャルの商業化 …… 74

4.　分子動力学法による物性評価

4.1　表面・界面のエネルギーと応力 …… 76
4.1.1　表面・界面エネルギー …… 76
4.1.2　表　面　応　力 …… 81
4.2　バルク部の応力の評価 …… 83
4.2.1　原子系における応力の定義 …… 83
4.2.2　ビリアル定理による応力の算出 …… 83
4.2.3　応力分布の評価法 …… 85
4.3　理想強度評価と結晶すべり …… 86
4.3.1　理　想　強　度 …… 86
4.3.2　GSF（一般化積層欠陥）エネルギー …… 87
4.3.3　結晶すべりの可視化 …… 89
4.4　構造安定性と臨界荷重の評価 …… 91
4.4.1　変形解析と構造緩和 …… 91
4.4.2　不安定平衡の問題 …… 93
コーヒーブレイク：MD は「異端」? …… 95

5.　プログラミング演習

5.1　MD コア部分の実装 …… 97
5.1.1　原子 3 個の配置 …… 97
5.1.2　Verlet法の実装 …… 98
5.1.3　3 次元への拡張とエネルギー計算 …… 100
5.1.4　`cfg` ファイルの書き出しと可視化 …… 103
5.2　周期境界条件の実装 …… 105

5.2.1 結晶構造ファイルの作成 ····· 105
5.2.2 結晶モデルの計算 ····· 107
5.2.3 bookkeeping 法の実装 ····· 111
5.2.4 温 度 制 御 ····· 113
5.2.5 応 力 計 算 ····· 113
5.2.6 平衡状態の格子定数の計算 ····· 116
5.3 ナノワイヤモデルの引張解析 ····· 118
5.3.1 1 次元周期境界の適用 ····· 119
5.3.2 原子構造緩和 ····· 122
5.3.3 準静的引張解析 ····· 124
5.3.4 引張解析の継続 ····· 126
5.3.5 緩 和 前 加 熱 ····· 128
5.4 EAM の 実 装 ····· 129
5.4.1 メッシュデータの利用 ····· 129
5.4.2 メッシュデータの作成 ····· 136
コーヒーブレイク：コードを書くべきか ····· 138

補 遺 ····· 140
A.1 Ewald 法の式の導出 ····· 140
A.1.1 式 (A.3) の証明 ····· 144
A.1.2 式 (A.15) の証明 ····· 144
A.1.3 式 (A.19) の証明 ····· 145
A.2 Tersoff ポテンシャルにおける力の表式 ····· 145
A.2.1 初期バージョン ····· 145
A.2.2 b の 微 分 項 ····· 148
A.2.3 ζ の 微 分 項 ····· 148
A.2.4 Multicomponent バージョン ····· 150
A.2.5 カットオフ関数の微分項 ····· 151

引用・参考文献 ····· 152
索 引 ····· 162

1 分子動力学法とは

計算機を用いた物理シミュレーションにはさまざまなものがあり，これまで数多くの方法論が提案されてきた。これは，自然科学を理解するための手段として，さまざまな実験観測・観察手法が考案されてきたことと同様であり，対象とする現象などによって適切な方法を選択する必要があることは，実験でもシミュレーションでも変わらないといえる。

分子動力学法は数ある物理シミュレーション法のうちの一つであるが，この方法を選択することが適切かどうかを考えるためには，その背景や位置づけを知っておく必要がある。

本章ではまず，分子動力学法の概要を簡単に述べたあと，分子動力学法の発展の歴史を振り返るとともに，材料強度分野における位置づけについて説明する。また，現在利用可能なソフトウェアパッケージについても，代表的なものを取り上げ紹介する。

1.1 分子動力学法の概要と歴史

物理の法則は一般に偏微分方程式で記述されるが，これを差分方程式に近似的に置き換え，計算機によって数値的に解くことによって物理現象を再現する方法を，一般に**コンピュータシミュレーション**†（computer simulation）と呼ぶ。近年ではコンピュータの能力が著しく向上し，京や富岳のような超大型のスーパーコンピュータ（スパコン）が登場するとともに，マルチコア・マルチノードの計算サーバが普及したことで，研究室レベルでもクラスタ並列計算機を設置することが容易となった。このような背景により，大規模なシミュレー

† 計算機シミュレーション，あるいは単にシミュレーションとも呼ぶ。解析といういい方も用いられることがある。

ションを行うことが一般的となり，さまざまな分野でコンピュータシミュレーションの役割が拡大している。

物質は原子の集合体であるから，その原子一つひとつの挙動を計算機で再現することができれば，ある条件（例えば，温度や外圧）のもとでの物質の振舞いを，原子レベルから明らかにすることが可能となる。次節以降で述べるように，原子群をニュートンの運動方程式に従う質点系とみなし，数値計算により原子の運動を追跡する方法を，**分子動力学法**[†1]（molecular dynamics; MD）と呼ぶ。**原子間ポテンシャル**（interatomic potential; ポテンシャル関数とも呼ばれ，原子の配置の関数として原子間相互作用のエネルギーを記述したもの）から各原子に働く力が求められるが，ポテンシャル関数が原子配置に関する幾何学的情報，例えば原子間の距離や角度の陽な関数として表される（すなわち，Schrödinger の波動方程式を解いて電子状態を求めるようなことはしない）ときには，これを**古典的分子動力学法**（classical molecular dynamics）と呼ぶ。

なお，「原子動力学」でなく「分子動力学」と呼ぶのは，この方法が初期のころ，水などの液体の挙動を解明するために用いられたことに起因するものと思われる。Alder と Wainwright が剛体球モデルを用いて行った計算[1)†2] が，分子動力学シミュレーションとして最初のものとされている。

その後，Rahman が液体アルゴンのシミュレーションを行ったが[2)]，Lennard-Jones ポテンシャル（smooth で微分可能な関数[†3]）を用い，運動方程式を解くことによって原子の軌跡を求めたという点で，現在広く用いられている分子動力学法の原型が作られたともいえる。1970 年代には，Stillinger と Rahman[3)] によって，水などの液体のシミュレーションが盛んに行われ，長距離クーロン

---

†1　本書では基本的には「分子動力学法」という呼称を用いるが，特に誤解を招く恐れのない場合は MD（法）と呼ぶこともある。また，原子間の相互作用を扱うものの原子の運動方程式を解く動力学計算ではないもの（Monte Carlo 法，分子静力学法など）も存在するが，分子動力学法とこれらをまとめて「**原子モデルシミュレーション**（atomistic model simulation）」と呼ぶこともある。

†2　肩つきの数字は，巻末の引用・参考文献の番号を示す。

†3　第 3 章参照。

相互作用を効率よく計算する手法が工夫されるなどした。また，イオン性結合材料に適した原子間ポテンシャル関数の出現により，シリカなどを対象としたシミュレーションが盛んに行われ，この頃に分子動力学法の基礎が築かれた。

1980 年代には Andersen の圧力制御法，Parrinello-Rahman の応力制御法，Nosé-Hoover の温度制御法など，いわゆる拡張系のハミルトニアンを解く分子動力学法[†1] が提案され，より現実的な分子動力学計算を行うための手法が発展した。なお，本書では触れないが，**密度汎関数理論**（density functional theory; DFT）に基づいた**第一原理分子動力学法**[†2]（first-principles molecular dynamics; **Car-Parrinello 法**とも呼ばれる）が発表されたのが 1985 年である。

1990 年代になると 3 体間ポテンシャルや多体ポテンシャル[†3] など，さまざまな固体材料に適した原子間ポテンシャルの研究が活発化し，分子動力学法で扱える材料の対象範囲が大きく広がった。本書のテーマである，固体材料強度や物性評価への分子動力学法の本格的な適用が始まったのは，この頃からである。その後，電荷移動や化学反応を記述できる複雑なポテンシャル関数が出現し，原子レベルの機械的挙動と化学的挙動が複合したような問題への適用が可能となるなど，分子動力学法の適用範囲はさらに拡大していった。

2000 年代後半には，機械学習・深層学習の考え方を原子間ポテンシャル関数に応用することが提案され，原子間相互作用を**ニューラルネットワーク**モデル（neural network model）などを用いて表現するという新たな方法論が研究されるようになった。これによって，高性能なポテンシャルをシステマティックに[†4] 構築することが容易になり，さまざまな**機械学習ポテンシャル**（machine

---

†1　2.4 節参照。

†2　第一原理（first-principles）計算とは，Schrödinger の波動方程式を非経験的に（実験値などへのフィッティングや，人間が勝手に決めたパラメータを用いることなしに），できるかぎり厳密に解くことで電子状態や原子間相互作用を求める方法である。ただし近似を用いないというわけではない。ちなみに第一原理は *ab initio*（from the beginning の意味のラテン語）とも呼ばれることもあるが，DFT 系の第一原理計算を *ab initio* と呼ぶと怒られる場合があるので，first-principles と呼ぶほうが無難である。

†3　第 3 章参照。

†4　どちらかといえば，計算機能力をフル活用して力技でポテンシャル関数を構築する，という考え方に近いと思われる。

learning potential; MLP）の作成や検証が精力的に行われている。このようなアプローチは，従来型のポテンシャル関数を用いる古典的手法と第一原理的手法の中間的な位置に立つもの（精度的にも計算コスト的にも）と見られており，両者の間に存在していた大きなギャップを埋めるものとして注目されている。ただし，物理的な描像を一切内包しないモデルを用いることに問題はないのかという懸念は，あまり指摘されることがないものの[†1]，簡単に無視できる問題ではないと思われる。

1.2　材料強度物性評価における分子動力学法の位置づけ

1.2.1　分子動力学法の長所と短所

分子動力学法では，材料を原子の集合体として表現し，第 2 章で解説するように各原子についての運動方程式を立てる。そのため，現実的に取り扱うことのできる系のサイズ（**空間スケール**（spatial scale））がきわめて小さいという問題がある[†2]。また，のちに述べるように数値計算の時間刻み幅も，フェムト秒（fs，1×10^{-15} 秒）単位に細かくとらなければならないため，追跡できる**時間スケール**（time scale）についても強い制約がある[†3]。したがって，マクロの世界で観察される現象をそのまま「まるごと」シミュレーションしようという考えは現実的とはいえず，空間的にも時間的にもその一部を切り取った，きわめて狭い window を覗（のぞ）くような解析を行うことになる。

では，なぜわざわざ分子動力学法を用いなければならないのか？ それは，上述した欠点とまさにコインの裏表なのであるが，時間的・空間的解像度が非常に高いことにある。分子動力学法を用いれば，材料の微視的構造や，変形や破

---

†1　今までにないまったく新しいコンセプトが登場した際，そのメリットばかりが強調され，危険性やデメリットについて指摘する声を上げづらい（下手（へた）をすると潰される）というのは，どの分野においても同様である。

†2　例えば，一辺 1 μm の立方体の微小な Al 結晶を対象とする場合でも，約 6×10^{10}（600 億）個もの原子に対する運動方程式を解くことになる。

†3　1 μs の現象を追跡するためには，時間刻みが 1 fs の場合，10^9（1 兆）回もの繰返し計算が必要となる。

壊のプロセスにおける材料の振舞いが原子レベルの解像度で解明できる（空間的解像度）。また，結晶すべりや脆性（ぜいせい）破壊のような，きわめて短い時間で起こるプロセスの過程を追跡することができる（時間的解像度）。**図 1.1** はき裂の分子動力学法シミュレーションの一例であるが，まるで超高解像度のビデオカメラを材料内部に設置したかのように，非常に短時間で起こるナノ領域[†1] の現象を動的に再現できる。このような，実験などの方法ではアクセスがきわめて難しい，材料挙動に関する知見を得ることができるのが大きな長所である。

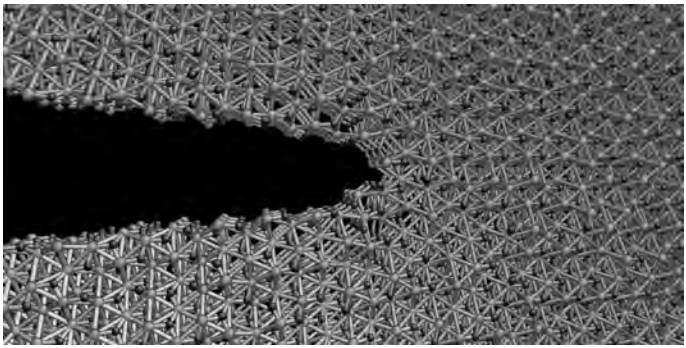

図 1.1　き裂の分子動力学法シミュレーションの例（材料は GaN）：脆性材料におけるき裂進展のように一瞬で破壊が進んでしまうような構造不安定問題に対しても，分子動力学法を用いれば，原子間結合の断裂が連鎖的に進んでいく様子を観察することができる

また，ひとたび原子間ポテンシャルを決めてしまえば，塑性や破壊を規定する**構成則**（constitutive law）などが必要ないという点も，利点として挙げられる。例えば有限要素法解析で破壊を扱うためには，要素がどのような条件を満たした場合に破壊したとみなすかを規定する，「**破壊基準**（fracture criterion）」を決めてやる必要がある[†2]。分子動力学法ではそのような煩雑な手続きは必要なく，変形や破壊は原子間相互作用の結果として「勝手に」現れる[†3]。

---

†1　1 nm（ナノメートル）$= 1/1\,000\,\mu\mathrm{m} = \times 10^{-9}\,\mathrm{m}$

†2　相当応力やひずみなどに対して臨界値を決めておき，その値に達した要素は破壊したものとみなして要素分割や要素削除を行うことで，破壊のシミュレーションが行われる。

†3　……というよりは，塑性や破壊といった材料挙動をつかさどる支配則は，原子間ポテンシャルにすべて内包されているというべきかもしれない。

索　　引

【あ】

アフィン変形 *87*

【い】

一般化積層欠陥エネルギー *88*
イメージセル *18*

【か】

カーボンナノ構造体 *65*
外力負荷 *91*
ガウシアン近似ポテンシャル *73*
角度依存項 *47*
仮想質量 *29*
カットオフ距離 *19*
環境非依存性 *43*

【き】

機械学習ポテンシャル *3, 72*
基本セル *18*

【く】

空間スケール *4*
クーロン相互作用 *36*
グラフニューラル
　ネットワーク *73*

【け】

経験的ポテンシャル関数 *10*
原子間ポテンシャル *2, 9, 43*
原子間ポテンシャル関数 *10*
原子挿入法ポテンシャル *52*
原子モデルシミュレーション *2*

【こ】

構成則 *5*
構造緩和計算 *30*
古典的分子動力学法 *2*
コンピュータ
　シミュレーション *1*

【し】

シェルモデル *68*
時間スケール *4*
時間発展 *9*
遮　蔽 *60*
周期境界条件 *17*
準静的変形 *92*
準ニュートン法 *31*
状態方程式 *62*

【す】

数値実験 *6*
数値積分 *9*
スーパーセル法 *18*
スプライン補間 *130*
スラブモデル *18*

【そ】

速度スケーリング法 *22*

【た】

第一原理分子動力学法 *3*
ダイポールモデル *70*
多重極子 *58*

【ち】

中心対称性パラメータ *90*

【て】

データサイエンス *72*
電荷移動ポテンシャル *71*

【な】

ナノ材料 *87*

【に】

ニュートン法 *31*
ニュートン力学 *9*
ニューラルネットワーク *3*
ニューラルネットワーク
　原子間ポテンシャル *72*

【は】

破壊基準 *5*
反応分子動力学法 *71*
反応力場 *71*

【ひ】

表面エネルギー *76*
表面応力 *81*
ビリアル応力 *83*
ビリアル定理 *25, 83*

【ふ】

不安定平衡状態 *94*
分子動力学法 *2*

【へ】

ペアポテンシャル 44
ヘッシアン 32

【ほ】

ポテンシャルフィッティング 43
ボンドオーダー 63
ボンドオーダーポテンシャル 63

【み】

密度汎関数理論 3

【よ】

予測子・修正子法 14

【り】

理想強度 86
理想せん断強度 86
理想引張強度 86
領域分割法 21

【れ】

レプリカセル 18

【A】

ADP 60
AIREBO ポテンシャル 68
Andersen 法 25
AtomEye 103

【B】

BFGS 法 31
BMH ポテンシャル 46
bookkeeping 法 20
BOP 64
Brenner ポテンシャル 65
Buckingham ポテンシャル 46

【C】

Car-Parrinello 法 3
`cfg` 形式 103
CMAS 47
COMB ポテンシャル 71

【E】

EAM ポテンシャル 52
EDIP 64
Ewald 法 36

【F】

FIRE 34
FS ポテンシャル 55

【G】

GAP 73
GEAM ポテンシャル 55
gloc 34
GNN 73
GSF エネルギー 88

【L】

LAMMPS 8
LJ ポテンシャル 45

【M】

MEAM ポテンシャル 58
Mishin ポテンシャル 55
MLP 72
Morse ポテンシャル 45
Morse ポテンシャル関数 12

【N】

neighbor list 20
NNP 72
Nosé-Hoover 法 22
NPH アンサンブル 22
NVE アンサンブル 21
NVT アンサンブル 22

【O】

OVITO 103

【P】

Parrinello-Rahman 法 25
Python 97

【R】

ReaxFF 71
REBO ポテンシャル 65

【S】

SW ポテンシャル 48

【T】

Tersoff ポテンシャル 49

【V】

Verlet 法 13

【W】

Wolf 法 38

【数字】

2 体間ポテンシャル 10, 44

—— 著 者 略 歴 ——

1995年　京都大学工学部物理工学科卒業
1997年　京都大学大学院工学研究科修士課程修了（機械物理工学専攻）
1999年　京都大学大学院工学研究科博士後期課程中退（機械物理工学専攻）
　　京都大学大学院助手
2002年　博士（工学）（京都大学）
　　京都大学大学院講師
2004年　文部科学省海外先進教育研究実践支援プログラム在外研究員
　　（カールスルーエ工科大学，～2005 年）
2006年　東京大学生産技術研究所助教授
2007年　東京大学生産技術研究所准教授
2021年　東京大学生産技術研究所教授
　　現在に至る

固体材料の強度と物性評価のための 分子動力学法入門
Introduction to Molecular Dynamics: For the Evaluation of Strength and Properties of Solid Materials

© Yoshitaka Umeno 2025

2025 年 12 月 12 日　初版第 1 刷発行　★

検印省略

著　　者　梅野宜崇（うめの よしたか）
発 行 者　株式会社　コロナ社
　　代表者　牛来真也
印 刷 所　三美印刷株式会社
製 本 所　有限会社　愛千製本所

112–0011　東京都文京区千石 4–46–10
発 行 所　株式会社　コロナ社
CORONA PUBLISHING CO., LTD.
Tokyo Japan
振替 00140–8–14844・電話(03)3941–3131(代)
ホームページ　https://www.coronasha.co.jp

ISBN 978–4–339–04699–1　C3053　Printed in Japan　（田中）

JCOPY　<出版者著作権管理機構 委託出版物>
本書の無断複製は著作権法上での例外を除き禁じられています。複製される場合は，そのつど事前に，出版者著作権管理機構（電話 03-5244-5088，FAX 03-5244-5089，e-mail: info@jcopy.or.jp）の許諾を得てください。

本書のコピー，スキャン，デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられています。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は，いかなる場合も認めていません。落丁・乱丁はお取替えいたします。