

機械・材料設計に生かす

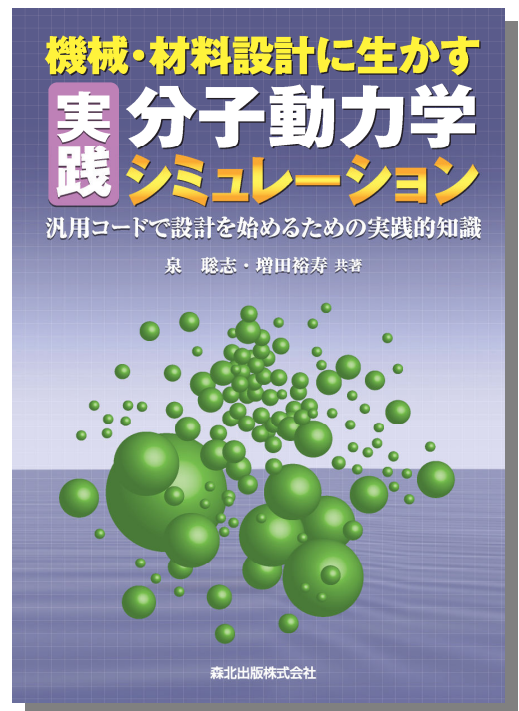
# 実践 分子動力学 シミュレーション

汎用コードで設計を始めるための実践的知識

東京大准教授 泉 聡志 富士通株式会社 増田裕寿

160頁 定価3,570円 ISBN:978-4627-92161-0

2013年11月発行



## 【分子動力学シミュレーションを始めよう】

- ・ 汎用コードを使って初めて分子動力学計算を行う研究者/技術者を対象に、計算の基礎から実践的知識までをまとめています。
- ・ 具体的な例題や演習問題を通して、「原子間ポテンシャルの選び方」「パラメータの選び方」などの経験的知識が身につくとともに、得られた結果の解析方法がよくわかります。

※例題・演習の実践のために、本書専用のソフトウェア『SCIGRESS ME 特別版』をご利用いただけます。

### 【理論編】

- 1章 分子動力学計算の基礎
- 2章 原子間ポテンシャル

### 【実践編】

- 3章 分子動力学の実践モデリング
- 4章 マルチスケール解析への展開

### さまざまな演習問題を収録

融点の求め方 / 固相成長  
線膨張係数の算出  
比熱の算出と材料依存性  
アモルファス構造の動径分布関数  
拡散係数の求め方  
弾性定数の求め方(ひずみ制御/応力制御)  
空孔形成エネルギーの算出  
表面エネルギー / 界面エネルギー  
カーボンナノチューブの座屈変形  
結晶成長の初期過程  
ナノピラーの塑性変形

◆書籍のご購入・ご注文などに関するお問い合わせは下記までお願いいたします。

森北出版株式会社

〒102-0071

東京都千代田区富士見1-4-11

【TEL】 03-3265-8342

【FAX】 03-3264-8709

【URL】<http://www.morikita.co.jp>

【e-mail】[eigy@morikita.co.jp](mailto:eigy@morikita.co.jp)