

物理実験
分子動力学法

金沢大学 理工学域 数物科学類 コース: 物理太郎

平成 27 年 5 月 8 日

1 はじめに

分子動力学とは...

ここでは、分子動力学の背景などその実験の意義、方法の重要性などについて書き記すこと。提出前にセルフチェック項目 [checklist.doc](#) をチェックすること。

2 実験方法の理論

教科書を丸写しするのではなく、自分で再構成し、自分の言葉で書くこと。また、参考にした文献があれば [1] のようにして引用し、レポート最後の参考文献の欄に示すこと。参考文献に引用した文献は必ず本文中で引用すること。

3 実験装置、実験手順について

再現できるように実験装置（本実験の場合はパソコンや OS、プログラム言語、プログラムの構成...など、詳しく記すこと）

4 実験結果

結果については、図、表だけではなく、それらについて文章で説明すること。その過程で気づくことがあると思われる。それについては、考察で議論すること。図 1 に図の例としてプロトン化された水分子ダイマーの H_5O_2^+ の安定構造を示す。図を表示した場合には必ず「図番号に～を示す、示した」等と本文中で引用し、説明すること。そのようにしておけば、図の表示位置がずれたとしても、本文から参照できる。図の下に図番号と内容の説明を書くこと。グラフで複数の線種を用いた場合は、「赤実線が運動エネルギー、青破線が全エネルギー」などのように書き入れること。次に表について説明する。表 1 に表の例を示した。表の場合は、表の上側に表番号とその説明を示すこと。

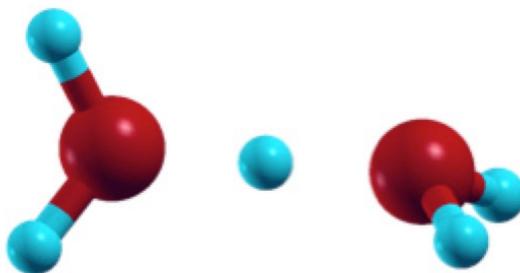


図 1: H_5O_2^+ の安定構造。青の球は水素原子、赤の球は酸素原子を表す。

表 1: 炭素クラスターの平均結合長と凝集エネルギー

炭素クラスターの種類	平均結合長 (nm)	凝集エネルギー (eV)
C ₆₀	0.14	...
C ₁₀₀	0.15	...

5 考察

結果の解析で明らかになったことについて、これまで知られている知見 (本, 論文等を調べること, web の引用はなるべくしないこと) と比較してどうか, 得られた結果は最も正しいか, 物理的に考察すること.

6 まとめ

まとめは, それまでに述べたことを簡潔にまとめなおすことである. 繰返しになっても良いので, 全体をまとめるように書くこと. 「はじめに」と「まとめ」を読めば, 実験の概要が理解できるように, 方法, 重要な結果や考察について, しっかりと書くこと.

参考文献

- [1] 金森順次郎, 川村清, 米沢富美子, 寺倉清之: 『固体 -構造と物性』, 岩波書店 (2001)