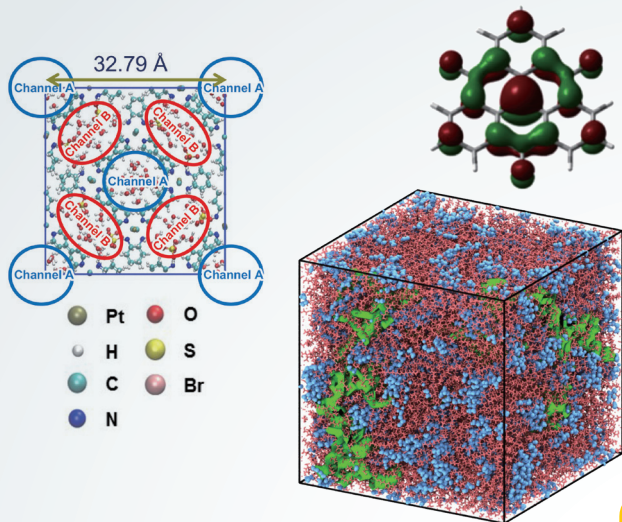
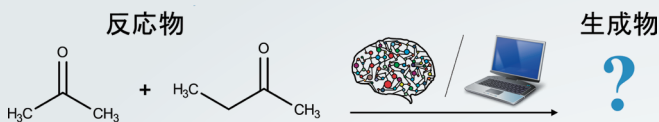


その材料、計算しましたか？



今日からはじめる

計算材料科学

理論家も実験家も、大学院生も研究者も、アカデミアも企業の方も、

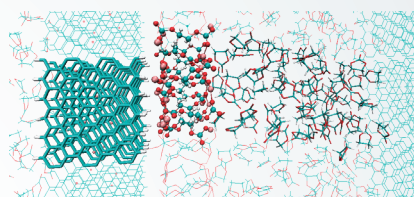
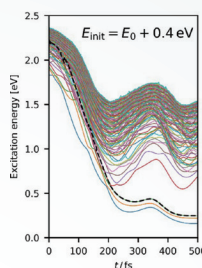
早稲田大学 各務記念材料技術研究所

計算材料科学
連続セミナー



化学材料第1シリーズ

2022年5月～2022年6月



第1回

量子化学計算

材料開発のための構造・反応性・物性の理論評価

中井 浩巳

■ 早稲田大学 先進理工学部
化学・生命化学科 教授



5/11(水) 16:00-18:30
5/12(木) 16:00-18:30

第一原理計算

蓄電池・触媒の界面化学・イオニクス

館山 佳尚

■ 物質・材料研究機構
エネルギー・環境材料研究拠点
副拠点長



5/25(水) 16:00-18:30
5/26(木) 16:00-18:30

第3回

分子動力学計算

高分子材料が示す諸特性と
その分子機構

岡崎 進

■ 東京大学大学院
新領域創成科学研究科
物質系専攻 特任教授



6/15(水) 16:00-18:30
6/16(木) 16:00-18:30

マテリアルズインフォマティクス

化学原理構築から材料設計まで

清野 淳司

■ 早稲田大学
先進理工学研究科
化学・生命化学専攻 准教授



6/22(水) 16:00-18:30
6/23(木) 16:00-18:30

第2回

第4回

※敬称略

開催方法

オンライン (Zoom ミーティング)

対象

一般 (大学学部レベルの理系知識を持っていることを想定した内容です)

参加費

無料

申込方法

右記のURLよりお申し込みください。 <https://www.waseda.jp/fsci/zaiken/news/6404>

受付期間は各回の日程の1週間前の17:00までです。



お問合せ

早稲田大学各務記念材料技術研究所 zaikenjointjimu@list.waseda.jp

化学材料のための計算科学入門

化学物質を用いた材料は、化学材料と表現することは稀で、通常は有機材料・無機材料・有機無機ハイブリッド材料などのようにその成分により分類される。計算科学でこれらの材料を取り扱う場合、材料自体を扱う上でも結晶・アモルファス・溶液・膜など様々な形態である。また、これらの材料を生成する過程である化学反応も計算科学の研究対象である。したがって、これらを研究する上で、量子化学計算・第一原理計算・分子動力学計算などが用いられる。最近では、材料探索という観点から機械学習などのAI技術を利用したマテリアルズインフォマティクスにも注目が集まっている。本連続セミナーでは、量子化学計算・第一原理計算・分子動力学計算・マテリアルズインフォマティクスを取り上げて、背景となる理論の解説から実際の応用研究の紹介などを行う。



第1回

量子化学計算 材料開発のための構造・反応性・物性の理論評価

5/11(水) 16:00-18:30

5/12(木) 16:00-18:30

中井 浩巳 (早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授)

原子・分子や分子集合体の多くの性質は、非相対論的なSchrödinger方程式あるいは相対論的なDirac方程式で決定される電子状態により理解できる。量子化学計算は、通常、ガウス基底を用いてこれらの基礎方程式を数値的に解く手法である。本セミナーでは、量子化学計算の理論的背景および一般的な適用例を説明した後、材料開発の研究現場でどのように使用されるか具体例を示しながら解説する。

【経歴】

1992 京都大学大学院 工学研究科 合成化学専攻 博士後期課程 修了 (博士 (工学))
1992-1996 京都大学 工学部 合成・生物化学科 助手
1996-2006 早稲田大学 理工学部 化学科 専任講師・助教授・教授
2006-現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授
(学部再編に伴う学部・学科名称変更)
2002-2003 米国 ライス大学 化学科 客員教授
2014-現在 英国 王立化学会(RSC) フェロー

第2回

第一原理計算 蓄電池・触媒の界面化学・イオニクス

5/25(水) 16:00-18:30

5/26(木) 16:00-18:30

館山 佳尚 (物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長)

エネルギー・環境の観点から蓄電池・触媒材料の研究開発が盛んに行われている。これらの材料では、電子とイオンの移動が機能発現に直結し、また固液などの界面が重要な反応場となっている。本講演では量子力学をベースにした第一原理計算、特に固体系・表面界面系の計算について説明した後、蓄電池・触媒材料の機構解明・材料設計の計算化学研究を具体例を挙げながら解説する。

【経歴】

1998 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了 (博士 (理学))
1998-2001 科学技術庁金属材料技術研究所 研究員
2001-2011 物質・材料研究機構 研究員・主任研究員・独立研究者
2003-2004 ケンブリッジ大学化学科 客員研究員 (兼務)
2011-2021 物質・材料研究機構 グループリーダー
2018-現在 早稲田大学理工学術院 客員教授
2021-現在 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長

第3回

分子動力学計算 高分子材料が示す諸特性とその分子機構

6/15(水) 16:00-18:30

6/16(木) 16:00-18:30

岡崎 進 (東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻 特任教授)

分子動力学計算の原理について解説した後、1000万原子レベルの大規模系への展開について、富岳など最先端の取り組みを紹介する。その上で、力学特性・熱特性・誘電特性・電解質膜・分離膜など、高分子が示す工業的に重要な諸特性、諸機能の発現メカニズムを、大規模全原子分子動力学計算に基づいて分子レベルで明らかにしていく研究を、具体例を挙げながら個々に解説する。

【経歴】

1982 京都大学大学院工学研究科工業化学専攻博士課程修了 (工学博士)
1982-1987 通産省工業技術院大阪工業技術試験所 研究員
1987-1995 東京工業大学大学院総合理工学研究科電子化学専攻 助手
1995-2001 東京工業大学大学院総合理工学研究科電子化学専攻 助教授
2001-2008 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 教授
2008-2020 名古屋大学大学院工学研究科応用化学専攻 教授
2021-現在 東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻 特任教授

第4回

マテリアルズインフォマティクス 化学原理構築から材料設計まで

6/22(水) 16:00-18:30

6/23(木) 16:00-18:30

清野 淳司 (早稲田大学 先進理工学研究科 化学・生命化学専攻 准教授)

近年、材料開発と情報処理技術が融合したマテリアルズインフォマティクス (MI) に関する研究が大きく進められている。本セミナーでは、機械学習・記述子・データベースなど、化学におけるMIを推進するための基礎を説明する。また材料開発、化学反応予測、実験条件最適化、スペクトルの自動解析、化学原理・法則の自動構築を例として、幾つかの具体的な研究事例を述べる。

【経歴】

2010 首都大学東京大学院理工学研究科物質化学専攻 博士後期課程修了 (博士 (理学))
2010-2012 早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科 助手
2012-2015 日本学術振興会特別研究員(PD)
2015-2020 早稲田大学理工学術院総合研究所 次席研究員 (研究院講師)
2020-2021 東京都立大学理学部化学科 特任准教授
2021-現在 早稲田大学先進理工学研究科化学・生命化学専攻 准教授