

その材料、計算しましたか？

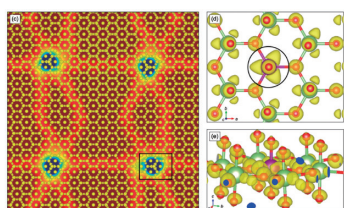
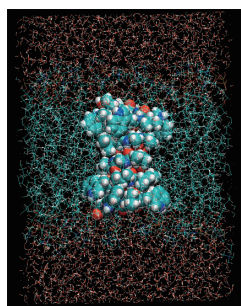
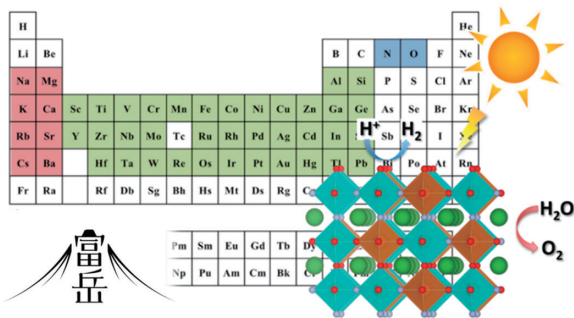


今日からはじめる

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、

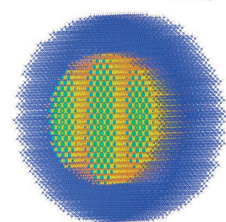
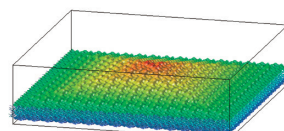
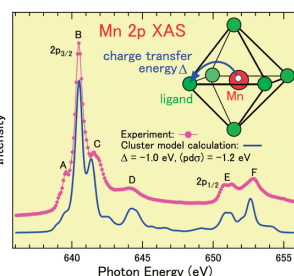


早稲田大学 各務記念材料技術研究所

計算材料科学
連続セミナー



電子材料第2シリーズ 2022年10月～11月



第1回

物質・材料シミュレーションの
今とこれから

常行 真司 先生

■ 東京大学
大学院理学系研究科 教授

10/25(火) 14:00-17:15



第2回

材料科学のための
内殻電子励起の理論

溝川 貴司 先生

■ 早稲田大学
先進理工学部
応用物理学 教授

10/31(月) 13:00-18:00



第3回

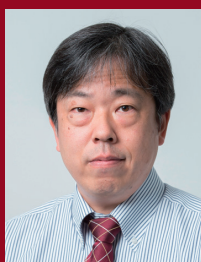
密度汎関数法にもとづく
計算物質材料科学

宮崎 剛 先生

■ 物質・材料研究機構
国際ナノアーキテクトニクス
研究拠点(MANA)
主任研究者/グループリーダー

11/22(火) 14:00-17:15

11/24(木) 14:00-15:30



※計270分

第4回

シミュレーションと
インフォマティクスによる
新材料設計・探索

中嶋 隆人 先生

■ 理化学研究所 量子系分子科学
研究チーム チームリーダー

11/28(月) 15:00-16:30

11/29(火) 15:00-16:30

11/30(水) 15:00-16:30



※計270分

開催方法

オンライン開催 (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/6848>

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



本セミナーでは、電子材料をターゲットとして、スーパーコンピュータを用いたシミュレーション、多体計算による実験結果のスペクトル解析、密度汎関数法に基づく大規模第一原理計算、材料シミュレーションと材料インフォマティクス総合的活用などについて、4回に分けて講義を実施いたします。なお受講者は大学学部レベルの理系知識を持つことを想定します。

第1回

物質・材料シミュレーションの今とこれから

10/25(火) 14:00-17:15

常行 真司 (東京大学 大学院理学系研究科 教授)

物質・材料研究では、物性とその発現機構の理解や予測、あるいは新物質・新材料の発見を目的として、コンピュータシミュレーションが用いられる。それを支えるのは、コンピュータ自体の開発とシミュレーション手法の開発である。

本講義の前半では、日本で開発されたスーパーコンピュータ「富岳」での事例を中心に、近年可能になった大規模シミュレーションについて概観する。後半では、熱電材料の格子熱伝導率、電子デバイス材料の熱膨張率、高周波デバイス材料の複素誘電率など、材料研究でニーズの高い非調和格子振動物性に関するシミュレーション手法開発を紹介する。最後にシミュレーションを駆使した今後のマテリアルDXについて展望する。

【経歴】

1984年3月	東京大学理学部物理学科卒業
1986年3月	東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修士課程修了
1987年3月	東京大学理学部物理学科助手
1992年4月	東京大学物性研究所助教授
2002年4月	東京大学大学院理学系研究科助教授
2007年8月-	東京大学大学院理学系研究科 教授

第2回

材料科学のための内殻電子励起の理論

10/31(月) 13:00-18:00

溝川 貴司 (早稲田大学 先進理工学部 応用物理学科 教授)

遷移金属・希土類・鉛・ビスマスなどを含有する触媒や電池電極の研究において、内殻光電子分光や内殻X線吸収分光で金属種の原子価を評価することは必須項目になりつつある。しかし、内殻電子励起は多重項分裂や電荷移動など多体効果に起因するスペクトル構造を伴うことが多く、それらに十分に習熟していなければ原子価の解釈を誤ってしまう可能性がある。

本講義では、クラスターモデルでの多体計算によって光電子分光・X線吸収分光・非弾性X線散乱を解析する計算手法について解説する。原子価を正しく評価するだけでなく、金属種の電子状態について詳細な情報を抽出することができる。

【経歴】

1993年-1998年	東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 助手
1996年	博士(理学)取得(東京大学)
1998年-1999年	フローニンゲン大学博士研究員
1999年-2015年	東京大学大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻 助(准)教授
2015年-	早稲田大学理工学術院先進理工学部応用物理学科 教授

第3回

密度汎関数法にもとづく計算物質材料科学

11/22(火) 14:00-17:15

11/24(木) 14:00-15:30

※計270分

宮崎 剛 (物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点(MANA)主任研究者/グループリーダー)

密度汎関数法にもとづく第一原理計算は、様々な物質・材料における原子スケールの構造と電子状態を解明するのに貢献してきた。

本セミナーでは、第一原理計算手法の基礎理論を学んだ後に、実際の物質・材料における研究例をいくつか紹介し、複雑な構造と多様な物性を計算科学からどのように理解することができるかを示す。時間が許せば、我々が開発してきた大規模第一原理計算プログラムCONQUESTを紹介し、機械学習による解析手法も併用することにより、第一原理計算にもとづいた研究対象がより多くの物質、材料、現象に広がっていることを紹介したい。

【経歴】

1995年	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))
1996年-2001年	科学技術庁 金属材料技術研究所 研究員
(1999年-2000年)	英国 University College London 外来研究員(科技厅派遣制度)
2001年-	国立研究開発法人 物質・材料研究機構 研究員
現在	物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点(MANA) MANA主任研究者/グループリーダー

第4回

シミュレーションとインフォマティクスによる新材料設計・探索

11/28(月) 15:00-16:30

11/29(火) 15:00-16:30

11/30(水) 15:00-16:30

※計270分

中嶋 隆人 (理化学研究所 量子系分子科学研究チーム チームリーダー)

エネルギー・環境問題の解決のための高機能材料に対する新材料設計や探索を実現するためには、材料シミュレーションと材料インフォマティクスを融合的に活用することが有効である。

本講義ではそのために必要な基礎の説明から始めて問題点を浮き彫りにし、問題解決に向けたわれわれのグループの最近の取り組みについて紹介する。

【経歴】

1993年3月	早稲田大学 大学院理工学研究科 化学専攻 修了
1996年3月	京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻 博士課程 研究指導認定退学
1997年9月	京都大学 博士(工学)
1997年9月-1998年3月	京都大学ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー 非常勤研究員
1998年4月-1999年2月	日本学術振興会 特別研究員(東京大学)
1999年3月-2003年7月	東京大学大学院工学系研究科 助手
2003年8月-2004年9月	東京大学大学院工学系研究科 講師
2004年10月-2007年3月	東京大学大学院工学系研究科 助教授
2007年4月-2009年10月	東京大学大学院工学系研究科 准教授
2009年11月-2010年9月	理化学研究所 基幹研究所 副ユニットリーダー
2010年10月	理化学研究所 量子系分子科学研究チーム チームリーダー(現職)