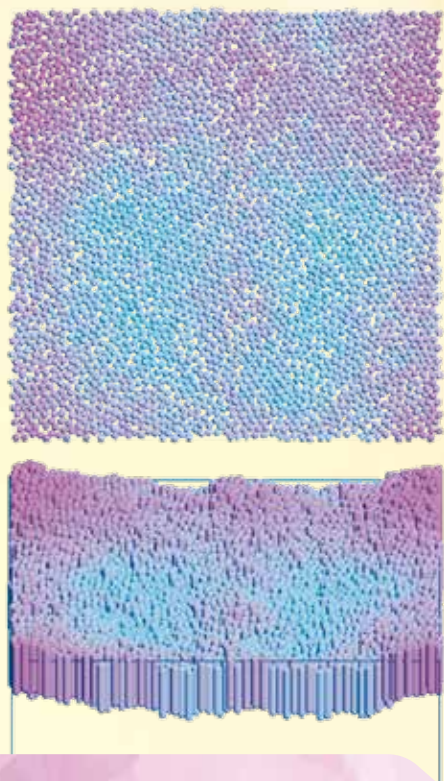


その材料、計算しましたか？



今日からはじめる

計算材料科学

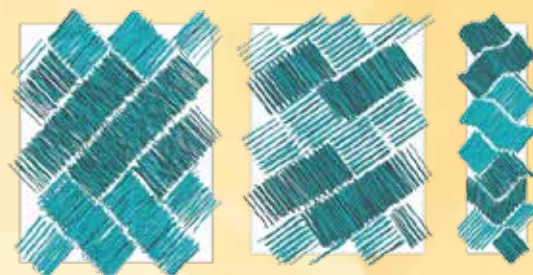
理論家も実験家も、大学院生も研究者も、アカデミアも企業の方も、

早稲田大学 各務記念材料技術研究所
計算材料科学特別セミナー

ソフトマター



2022年12月～2023年3月



【講師】

青木 圭子 先生

全4回

早稲田大学
各務記念材料技術研究所
客員上級研究員

第1回

ソフトマターとゆらぎ

2022. 12/21 [水] 13:00-18:00

第3回

ソフトマターのための分子動力学:
ストレステンソル制御法

2023. 2/8 [水] 13:00-18:00

第2回

分子動力学
シミュレーション入門

2023. 1/18 [水] 13:00-18:00

第4回

シミュレーションによる
物性値測定とその精度の確保

2023. 3/8 [水] 13:00-18:00

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/7061>

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

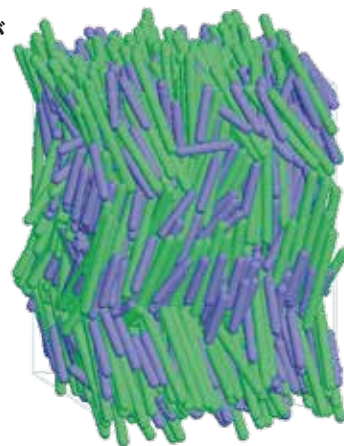


ソフトマター計算科学入門

ソフトマターは、柔らかくゆらぎが大きい性質から他の材料とは異なる数理的な扱いの難しさがあります。

その難しさおよび重要性は生体膜のシミュレーションに代表されますが、液晶や生体高分子などとも数理的な扱いの難しさは共通しています。また2相共存、気液界面など物質や材料がおかれた状況によっては似たような数理的な難しさが顕在化します。

本講座では、ソフトマターの物理的性質の理解からそのような性質をどう計算機科学として扱っていくのかを分子動力学法を中心にやさしく解説していきます。



第1回

ソフトマターとゆらぎ

2022.12/21[水] 13:00-18:00

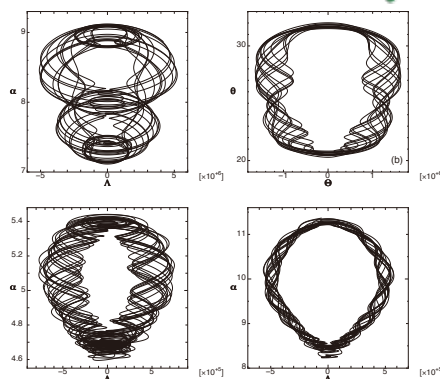
ソフトマターとは何か。その数理的な取り扱いがなぜ難しいのか。どのようなゆらぎが起こるのか、他の材料や状況との比較を通して見ていきます。また、周期境界・スケール座標など数理的な取り扱いの基本事項についても解説していきます。

第2回

分子動力学シミュレーション入門

2023.1/18[水] 13:00-18:00

分子動力学シミュレーションは、物質を構成する原子・分子の集団としての振る舞いを力学的に計算する手法です。もっとも簡単な体積一定の下でシミュレーションする方法から始めて、様々な統計アンサンブルを扱うことができる拡張法も解説します。

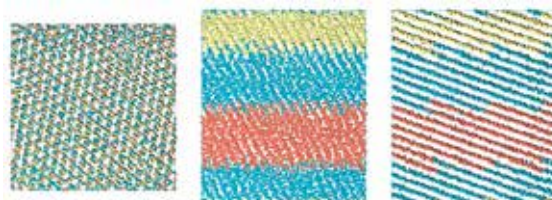


第3回

ソフトマターのための分子動力学：ストレステンソル制御法

2023.2/8[水] 13:00-18:00

ソフトマターやガラスなどに見られる異方的なゆらぎを扱うためのシミュレーション法であるストレステンソル制御法について解説します。ストレステンソル制御法は様々な統計アンサンブルを扱うことができるので、その一つ一つについて具体的に見ていきます。

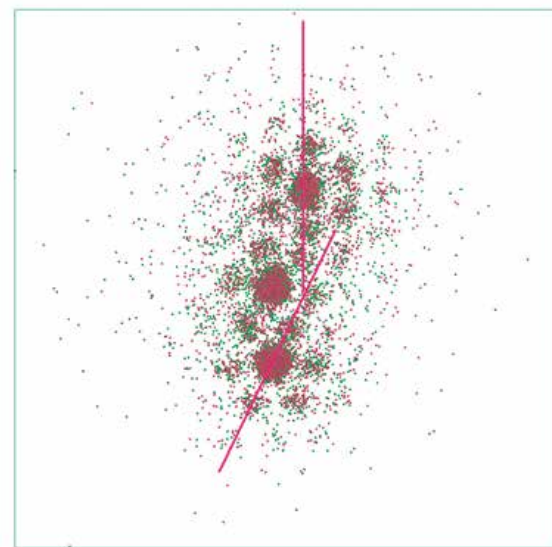


第4回

シミュレーションによる物性値測定とその精度の確保

2023.3/8[水] 13:00-18:00

分子動力学シミュレーションでは様々な物性値が測定できます。それらの物性値の具体的な計算方法を学びましょう。測定値の精度を確保するためには物理的な側面と数理的な側面の両面からその精度を検討する必要がある事を具体例を用いて紹介します。



青木圭子先生
プロフィール

1988年慶應義塾大学理工学研究科修士課程修了後、メルク・ジャパン(株)に入社し液晶材料の物性測定等に従事。液晶の美しさ・多様性・学際的な研究領域に惹かれ液晶の計算機シミュレーションを博士論文のテーマに決める。

1993年慶應義塾大学理工学研究科後期博士課程修了後、静岡大学工学部助手として粉粒体の流動化について実験およびシミュレーションに従事。その後、株式会社計算流体力学研究所に在籍中にはJST横山液晶微界面JST横山液晶微界面プロジェクトなど複数のプロジェクトに参加しストレステンソル制御法を開発。現在、早稲田大学各務記念材料技術研究所客員上級研究員。