

授業科目名	実用材料系のシミュレーション	必修の区分	
単位数	2.0	開講年次	
講師名	鷲津仁志	所属	シミュレーション学研究所
オフィス・場所		連絡先	
講義目的及び到達目標	<p>機械，電気，材料をはじめとする日本の産業において，物質の特性を理解し，より高機能なものへと工夫・発展させることは必要不可欠である．このような研究開発では，実験および理論が古くから用いられてきたが，現代ではシミュレーションを併用することは常識になりつつある．また，自動車や航空機，建築や土木など人よりも大きなものを設計する現場において連続体のシミュレーションは主要な開発手段となっているが，そうしたマクロなモデルの中にも材料特性を何らかの形で反映させなければ適切なものづくりにはならない．近年発展の著しい生命科学の分野においても，分子レベルからの理解が必須となっており，シミュレーションによる研究が盛んである．本講義は，そうした物質のシミュレーションのための基本的な方法を網羅的に解説し，材料シミュレーションの全体像を把握することを目的とする．材料の特性は表面の性状に支配されることが多いため，基礎的なトライポロジーの例も挙げながら解説する．内容としては，量子レベル，原子レベル，連続体レベルの計算手法について取り上げる．最終的には，現象に応じて適切なシミュレーション手法を選択し提案できることを目標とする．</p>		
講義内容・授業計画	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 実用材料のシミュレーション概説</li> <li>2. 材料シミュレーションの階層性</li> <li>3. 分子間に働く3つの相互作用</li> <li>4. 分子動力学(1) 概要</li> <li>5. 分子動力学(2) 計算の実際</li> <li>6. 分子動力学(3) 時間積分</li> <li>7. 分子動力学(4) 長距離力と拡張法</li> <li>8. モンテカルロ法と統計力学</li> <li>9. ブラウン動力学</li> <li>10. 量子化学の基礎</li> <li>11. 分子軌道法</li> <li>12. 密度汎関数法</li> <li>13. 連続体の各種計算手法</li> <li>14. 有限要素法</li> <li>15. シミュレーションを用いた材料開発</li> </ol>		
テキスト			
参考文献	参考となる図書は適宜示す．		
成績評価の基準	学生の習熟度と学習態度により，総合的に評価する．期末にレポート課題を課す．		
履修上の注意・履修要件			
地域に関する学修	該当しない．		
備考			