

第98回フロンティア材料研究所講演会

2.19 火
13:00 - 17:00

東京工業大学すずかけ台キャンパス
元素戦略研究センター
1F レクチャーホール

- チュートリアル：第一原理計算の基礎から応用 -

13:00~15:50（途中休憩20分）

「新しい材料を設計するための マルチスケール分子モデリングによる応用例」

ダッソー・システムズ バイオビア
アビジット チャタジー

最近の材料の設計、開発においては原子・分子レベルでの状態や現象の理解を深め、それに基づく材料開発を行うことが必要となってきています。このような中、近年のコンピュータ性能の向上に伴い、最近では原子や分子スケールのモデルを扱うコンピュータ・シミュレーションが材料研究において積極的に応用されるようになってきました。バイオビアのMaterials Studioはこのような原子・分子スケールの各種のシミュレーション手法を搭載したパッケージソフトウェアで、単一のプラットフォームから実行できるユーザフレンドリーな統合環境をご提供いたします。この講演では、有機合成、スペクトル解析、コーティング材料、膜設計、光学特性、拡散および接着挙動を例にして説明します。

16:00~17:00

「第一原理計算の基礎から応用例」

東京工業大学フロンティア材料研究所
神谷利夫

後半では、前半の講演で触れられていなかった点を中心に、第一原理計算、バンド理論の簡単な基礎、その他の材料設計・解析への応用例紹介するとともに、全般的な質問を受け付けます。

参加費無料

申込フォームより
お申し込みください。
ご登録いただきましたら、
資料配布の案内を差し上げます。



詳細WEB：
<http://www.msl.titech.ac.jp/seminar/2463.html>



問合せ先：神谷 利夫
(tkamiya@msl.titech.ac.jp)

東京工業大学すずかけ台キャンパス



主催 | 科学技術創成研究院
フロンティア材料研究所

共催 | 物質・情報卓越教育院

協賛 | 日本学術振興会 透明酸化物光・
電子材料第166委員会