

科目コード 8022030	授業科目名 和名：材料設計学 英文：Materials Design	学期 前期	曜日 木曜	時限 1,2	単位 2	条件 選択	対象学生 材料工学 3年次
担当教官名 佐藤 芳幸		所属 材料工学		学内室番号・電話番号 工3-210・889-2419		担当教官名 所属 学内室番号・電話番号	
		オフィスアワー		時間：随時		場所：工3-210	
<p>授業の目的・概要及び達成目標</p> <p>1. 目的・概要</p> <p>(1) 材料設計の概念を理解するために、材料物性を求める各種のコンピュータシミュレーションの方法を理解する。</p> <p>(2) 材料設計法を実際に応用するために、合金設計の手法を理解する。</p> <p>2. 達成目標</p> <p>(1) 乱数発生プログラムのアルゴリズムを理解でき、利用できる。</p> <p>(2) モンテカルロ法を用いたシミュレーションの概念を説明でき、利用できる。</p> <p>(3) 分子動力学法の概念を説明でき、初期条件および境界条件の与え方を理解できる。</p> <p>(4) 分子軌道法の概念を説明でき、簡単な分子軌道をシミュレートできる。</p> <p>(5) 合金ベクトルを用いた耐熱合金の設計法を説明でき、簡単な物性予測ができる。</p>							
<p>カリキュラム上の位置づけ</p> <p>材料物理学、固体構造化学、熱・統計力学等で学んだ基礎知識の応用である。また、計算機利用の観点から情報処理の技法に密接に関連し、すべての卒業研究課題の手法的基礎となる。</p>							
<p>授業の進行予定と授業の進め方</p> <p>1. 材料設計の概念</p> <p>2. 計算機シミュレーション(1)：熱力学計算</p> <p>3. 計算機シミュレーション(2)：モンテカルロ法(その1)</p> <p>4. 計算機シミュレーション(3)：モンテカルロ法(その2)</p> <p>5. 計算機シミュレーション(4)：分子動力学法(その1)</p> <p>6. 計算機シミュレーション(5)：分子動力学法(その2)</p> <p>7. 計算機シミュレーション(6)：分子軌道法(その1)</p> <p>8. 計算機シミュレーション(7)：分子軌道法(その2)</p> <p>9. 材料設計の実際(1)：合金設計(その1)</p> <p>10. 材料設計の実際(2)：合金設計(その2)</p> <p>11. 材料設計の実際(3)：合金設計(その3)</p> <p>12. 材料設計の実際(4)：半導体設計</p> <p>13. 材料設計の実際(5)：セラミックス設計</p> <p>14. 材料設計の実際(6)：ガラス設計</p> <p>15. 並列計算法の概要</p>							
授業に関連するキーワード	シミュレーション 分子軌道法	物性予測 計算状態図	モンテカルロ法 合金設計	分子動力学法			
<p>成績評価の方法</p> <p>各達成目標について、中間と期末に計2度の試験を行い、5つの達成目標の各項目で50%以上の評価を得た者を合格とする。ただし、1項目のみ50%未満の者については、その項目について講義期間内に再学習とレポート提出を求め、50%以上と評価できた場合は合格とする。</p>							
<p>教科書・参考書等</p> <p>参考書：山本良一編、「マテリアルデザイン」、丸善(1988)。</p> <p>参考書：川添良幸他、「コンピュータシミュレーションによる物質科学」、共立出版(1996)。</p> <p>参考書：堂山昌男、山本良一編、「計算材料科学」、海文堂(1987)。</p> <p>参考書：神山新一、佐藤明、「モンテカルロ・シミュレーション」、朝倉書店(1997)。</p>							