

登録コード	TSR05500	開講年度	2026				
授業科目	計算材料科学特論					担当教員	松中 大介
英文授業名	Computational Materials Science					副担当	森山 潤一郎
単位数	2	講義期間	後期	曜日・時限	水曜・3時限		対象学生
講義室	工W5-21教室		授業形態	講義	備考		
信大コンピテンシー	非該当						
(1)授業の達成目標	【授業で得られる「学位授与の方針」要素】				⇔	【授業の達成目標】	
	2 6 TSカリ, 2 5 TSカリ, 2 4 TSカリ, 2 3 TSカリ						
	【専攻】環境調和社会, 知識基盤社会を多様に支える工学分野の高度な専門知識と実践的技術力				⇔	電子状態計算および原子シミュレーションの基礎となる理論を理解し, 実際にモデル作成と条件設定を行なって材料特性に関するシミュレーションを行うことができる.	
(2)授業の概要	電子状態計算や原子シミュレーションなど計算材料科学の手法の基礎理論を学び, それぞれの計算手法を用いて簡単な解析を実習する. また, 種々の材料特性や物理現象に対する計算手法の適用を学ぶ.						
(3)授業計画	第1回材料特性とマルチスケールモデリング 第2回量子力学の基礎 (1) 第3回量子力学の基礎 (2) 第4回第一原理計算 (1) 第5回第一原理計算 (2) 第6回電子状態計算実習 第7回統計力学の基礎 (1) 第8回統計力学の基礎 (2) 第9回分子動力学法 第10回MDシミュレーション実習 (1) 第11回MDシミュレーション実習 (2) 第12回計算科学における機械学習の応用 第13回応用事例 (1) 第14回応用事例 (2) 第15回課題発表						
(4)成績評価の方法	課題 (70%) および受講時の質疑 (30%) から総合的に評価する.						
(5)成績評価の基準	計算手法の基礎理論を理解しプログラムを動作させることができれば「合格水準にある」, 計算結果から材料特性の議論・考察を行うことができれば「やや上にある」, 計算手法を対象とする材料・力学現象に自在に応用できれば「かなり上にある」, 複数の計算手法を組み合わせたり改良したりして発展的な計算ができれば「卓越している」と評価させれる.						
(6)事前事後学習の内容	授業時間30時間 (2時間×15回), 自習学習時間60時間 (4時間×15回) 毎回の授業時に自学習すべき内容を指示する.						
(7)履修上の注意	材料科学や固体力学に関する基礎的知識のほか, プログラミング言語 (CもしくはFortran) を習熟していることが望ましい.						
(8)質問,相談への対応	メールにて質問・相談, またはそのアポイントメントを受け付ける. アドレスは matsunaka@shinshu-u.ac.jpです. 研究室の場所は機械システム北棟2階です.						
(9)その他							
【教科書】	指定しない.						
【参考書】	Computational Materials Science, An Introduction / June Gunn Lee (CRC Press) コンピュータ・シミュレーションによる物質科学, 分子動力学法とモンテカルロ法 / 川添良幸・三上益弘・大野かおる (共立出版)						