

東北大学 金属材料研究所 HPCI 計算材料科学研究拠点 (CMRI)

CMSI 教育拠点 東北大学

教育・人材育成 配信セミナー

「マルチスケールの計算材料科学」

メイン会場：東北大学青葉山キャンパス 理学合同 B 棟 7 階 721 室 (大会議室) (発信元)

CMSI テレビ会議システムによる同時配信での受講可能会場：(会場詳細は別紙を参照ください。)

東北大学 (片平)・東京大学 (柏)・東京大学 (本郷)・東京大学 (駒場)・金沢大学・豊橋技科大学・  
分子研・名古屋大学・京都大学・大阪大学 (豊中)・大阪大学 (吹田)・CMSI 神戸拠点・  
産総研つくば・福井高専

日時：2014 年 3 月 5 日(水) 14:00-17:00

下記 URL より 3 月 3 日 (月) 15 時までに事前登録を行ってください。最寄り会場での受講が可能です。

URL：<http://www.cms-initiative.jp/ja/events/20140305-cmrihaishin>

(事前登録が無い会場は当日受付をしておりますので、ご注意ください。)

#### セミナー趣旨説明：

近年の計算材料科学の進展によりミクロからマクロにいたる時空間のマルチスケールにわたって材料物性について計算機を用いて研究を行うことが可能となりつつある。そこで、本拠点は「マルチスケール計算材料科学」を軸とした新素材の開発や材料物性の解明を目指している。今回のセミナーでは、材料科学の内部組織の形成過程の代表例である dendrite 成長 (ハードマター) と液晶のパターン形成 (ソフトマター) について計算材料科学の第一線で研究をされている 2 名の講師を招いて講演を行っていただく。また、セミナー参加者として、様々な異なるバックグラウンドや専門を持つ修士以上の学生や若手研究者などを対象とし、基礎から最新の研究成果までの講演を予定している。

#### スケジュール：

14:00 挨拶 川勝 年洋 教授 (東北大学 理学研究科 物理学専攻)

14:05-15:25 「フェーズフィールド・モデルの基礎と dendrite 成長への応用」

大野 宗一 准教授

(北海道大学 大学院工学研究院 材料科学部門 マテリアル設計分野)

15:25-15:35 休憩

15:35-16:55 「液晶の秩序構造形成の連続体シミュレーション」

福田 順一 主任研究員

(産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 ソフトマターモデリンググループ)

16:55-17:00 総括 川勝 年洋 教授

(司会 寺田 弥生 (東北大学 金属材料研究所 CMRI))

#### 問い合わせ先：

寺田 弥生 (email：[terada@imr.tohoku.ac.jp](mailto:terada@imr.tohoku.ac.jp))

東北大学 金属材料研究所 HPCI 戦略プログラム計算材料科学研究拠点<CMRI>

計算物質科学イニシアティブ事務局 (email：[adm-office@cms-initiative.jp](mailto:adm-office@cms-initiative.jp))

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

TEL 04(7136)3279 / FAX 04(7136)3441

## [1]

講演タイトル：

「フェーズフィールド・モデルの基礎とデンドライト成長への応用」

講師：

大野 宗一 准教授

(北海道大学 大学院工学研究院 材料科学部門 マテリアル設計分野)

アブストラクト：

材料開発におけるキーテクノロジーの一つは、材料組織の制御にある。材料組織とは、メゾ (数十 nm～数 mm) の空間スケールで現れる、構造や成分濃度の不均一パターンのものであり、このパターンがマクロな材料物性を決めている。そのような材料組織の時間発展をシミュレートする強力な手法として、フェーズフィールド・モデルが発展している。その応用範囲は、デンドライト成長、スピノーダル分解、析出、オストワルド成長、結晶粒成長、マルテンサイト変態、規則-不規則変態など、材料科学における相変態現象全般におよび、材料科学分野以外においても非平衡パターン形成を記述する計算手法として近年でも急速に発展している。本セミナーでは、フェーズフィールド・モデルの基礎、特に界面移動を記述する仕組みについて説明し、その応用例として合金凝固におけるデンドライト成長に関する最近の研究について紹介する。

## [2]

講演タイトル：

「液晶の秩序構造形成の連続体シミュレーション」

講師：

福田 順一 主任研究員

(産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 ソフトマターモデリンググループ)

アブストラクト：

液晶はソフトマターの興味深い例の一つであり、現在のディスプレイ技術の根幹をなしていることは良く知られている。のみならず、回転対称性/並進対称性の破れに基づく様々な秩序相を形成すること、それらの相が位相欠陥を示す(その多くは実空間で観察可能である)ことなどから、液晶は物性物理学の重要な研究主題の一つでもある。本講演では、回転対称性の破れに基づく配向秩序のみを有する液晶に着目して、配向秩序を連続な秩序変数で取り扱う連続体理論と、配向秩序がなす位相欠陥の基礎について紹介する。また、講演者の最近の研究成果の一つである、鏡映対称性が欠如した液晶(キラル液晶)が自発的にねじれた配向状態をとることによる秩序構造形成、特に平行平板間の狭い空間に液晶を閉じ込めた際に、液晶と基板との間の相互作用(アンカリング)とバルクにおける秩序形成との間のフラストレーションの結果として生じる様々な秩序構造の探索について述べる。

## 各会場詳細

会場	定員
東北大学青葉山キャンパス 理学合同B棟 7階 721室 (大会議室) (配信元)	20名
東北大学片平キャンパス 金属材料研究所 国際教育研究棟 2階セミナー室	20名
東京大学柏キャンパス 物性研究所 A614 セミナー室	24名
東大駒場 I キャンパス 16号館 406号室	7名
東京大学本郷キャンパス工学部 6号館 207	15名
分子科学研究所 実験棟 512号室	8名
名古屋大学 IB電子情報館 011室	100名
京都大学 福井謙一記念研究センター3F セミナー 1室	16名
豊橋技科大 情報基盤センターマルチメディア教室	50名
大阪大学豊中キャンパス 基礎工学部G217	20名
大阪大学吹田キャンパス 工学部R2-319	20名
CMSI 神戸拠点 (AICS 5階 R501)	14名
産総研つくば中央第2 D-714-2b *	10名
金沢大学 自然科学5号館 3F 324室	10名
福井工業高等専門学校 大会議室	20名

\*産総研は入館時に受付が必要なため、セミナー当日に、中央第2の玄関での受付をお願いいたします。なお、受付開始時間は13:30です。