

公開セミナー

主催：医療・化学コアステーション準備委員会
共催：理学部化学プログラム・自然科学研究科
数理物質科学専攻化学コース、
ユビキタスグリーンケミカルエネルギー
連携教育研究センター

日時：11月27日（木）16:30～17:30

場所：物質生産棟 講義室161

演者：吉田紀生 教授(名古屋大学)



演題：液体の積分方程式理論を基盤とした マルチスケール法の構築と応用

講演概要

近年、医療・工学・環境分野などのさまざまな分野において、対象となる材料の分子レベルの構造・機能特性の予測が必要とされており、計算科学の重要性が高まっています。

本講演では、我々がこれまでに取り組んできた分子溶媒和理論の構築とその数値実装について紹介します。特に、分子溶媒和理論の基礎、他の手法とのハイブリッド法の実装、プログラム開発と実装、そして最近の応用事例を紹介します。

問い合わせ先：韓 智海 (jhhan@chem.sc.niigata-u.ac.jp)