

第4回 SPERC イオン液体講演会

この度、岩手大学理工学部附属ソフトパス理工学部研究センター(SPERC)では、千葉大学大学院工学研究院 大窪貴洋 先生をお迎えして講演会を開催します。計算化学や核磁気共鳴実験をご専門とされる大窪先生は、長年、熔融塩技術を基盤としたエネルギーや環境関連のご研究に従事されて、目覚ましい研究成果を上げてこられました。

今回、大窪先生の多方面に展開されているご研究の一端をご講演いただく予定です。計算化学等の分野に関心をお持ちの教職員、学部学生、大学院生をはじめ、本学関係者以外のどなたでも参加できます。お誘い合わせの上、是非ともご参加下さい。

なお、本講演会は第44回 INS エネルギー変換技術研究会講演会および第7回岩手大学電気化学セミナーとの共催事業になります。

記

主催：岩手大学理工学部附属ソフトパス理工学研究センター(SPERC)
水素利用技術研究グループ イオン液体サブグループ

共催：INS エネルギー変換技術研究会

協賛：日本化学会東北支部(予定)、電気化学会東北支部(予定)

日時：令和6(2024)年1月24日(水) 13:30~14:30

場所：総合教育研究棟(化学系)南棟 109号室 (理工学部内)
(〒020-8551 岩手県盛岡市上田 4-3-5)

講演者：大窪 貴洋 准教授
千葉大学大学院工学研究院 共生応用化学コース
(研究室 HP: <https://amorphous.tf.chiba-u.jp>)



「応用化学でのプログラミング教育と研究」

工学部の中でもあまりプログラミングを重要としない応用化学やバイオ系の学科では、プログラミングのための講義が十分に準備されていない。その一方、分子シミュレーション、分析機器から大量に出力されるデータの解析、データサイエンスに基づいた材料開発等、プログラミングの必要性が年々高まりつつある。また、研究の独自性を発揮するためには、既存のコードを改造し、新しい理論や解析を自ら実装するためのプログラミングを必要とする。このような背景から、研究室では、材料やプロセス開発に計算資源を最大限活用できるようプログラミング教育に力を入れている。

本講演では、プログラミング初学者向け講義「コンピューター処理」の方法と内容、3年後期に研究室へ配属された学生向けセミナーで行っている計算化学のためのプログラミング技法の講義内容について紹介する。研究室では、計算化学と核磁気共鳴実験の基礎研究を基本とし、エネルギーと環境関連の「放射性廃棄物処分」、「二酸化炭素の固定化」、「次世代電池」に関連した学際的な研究プロジェクトを推進している。これら研究に関連したプログラム開発やスーパーコンピューターの利用についても紹介する。

Key words: Python, 第一原理計算, 分子動力学計算, プログラミング教育

参加費：無料(教職員, 学生, 一般)

連絡先：宇井幸一(理工学部 化学コース, イオン液体サブグループリーダー)

TEL: 019-621-6340, Email: kui@iwate-u.ac.jp