

数物科学専攻	研究分野	計算分子科学	Lab. ID MP22
研究室Webサイト	http://cmt.w3.kanazawa-u.ac.jp		
研究課題の概要			
<p>計算分子科学では、液体のような凝縮系の構造と動力学を支配するミクロな機構を解明するために、統計力学をベースに分子シミュレーションの方法を駆使して理論的に研究を進めています。新しいシミュレーション手法の開発も積極的に行っているところが特色として強調したいポイントです。研究対象は、いわゆる“分子科学”という分野名が指し示すものよりはもう少し広い領域をカバーしています。例えば、超流動ヘリウムのような量子液体を経路積分法に基づく量子シミュレーション法を用いて、その特異な物性に迫っています。また、蛋白質分子の折りたたみ問題や分子機械の動作原理の理解に向けて研究を進めています。</p>			
博士前期課程/後期課程院生の指導方針、具体的なカリキュラム、研究室での活動等			
<p>グループの構成員が全員参加するグループミーティングを週一回行います。スピーカーは教員を含めてメンバー全員の輪番で担当します。ミーティングでは、各自が行っている研究の発表や原著論文の紹介、あるいは関連分野のレビューをします。加えて、統計力学・量子力学の進んだ内容や分子シミュレーションに関するゼミ・輪読を別途行います。研究テーマについては、指導教員と相談しながら各自の興味とグループの状況等を勘案して決定します。</p>			
研究室生活の紹介等			
<p>広くて見晴らしのよい、快適な研究室です。冷蔵庫も電子レンジもあります(M1)。 学生にmac miniが一台ずつ与えられます。計算はサーバー室にある計算機にログインして行います(M2)。 週に3回ほどゼミがあり、論文や研究を発表したり、皆で一つの本を議論し合っています(M1)。</p>			
教員からのメッセージ			
<p>計算科学の領域は、現在多方面にわたり勢いよく拡大しています。当グループはその中で原子・分子の集合体を対象に基礎的な研究を進めています。シミュレーションのプログラムは自作して研究を実施することが多いですが、プログラミング初心者でも必ず作れるようになりますので、ご心配なく。また、ボトルネックとなる問題の理論的な分析をすすめて新しい方法を作ったり、凝縮系の物性に関する理論的な研究に興味がある人を歓迎します。コンパの好きな人は大歓迎です。</p>			
研究室連絡先メールアドレス	三浦伸一 < smiura*at*mail.kanazawa-u.ac.jp >		