

第6回ノートパソコンで出来る原子レベル のシミュレーション入門講習会

～分子動力学計算と電子状態計算～

(http://www.fml.t.u-tokyo.ac.jp/MD_WS/)



開催日 平成21年9月7日(月), 8日(火)

主催 日本材料学会
協賛 日本機械学会, 日本金属学会, 日本材料強度学会, 日本材料科学会, 日本原子力学会, 日本航空宇宙学会, 日本船舶海洋工学会, 高分子学会, 日本複合材料学会, 精密工学会, 応用物理学会, 溶接学会, 日本高圧力学会, 日本セラミックス協会, 日本鉄鋼協会, 日本溶接協会, 化学工学会, 電気学会, 電子情報通信学会, 日本塑性加工学会, 土木学会, 日本応用数理学会, 日本計算工学会, 日本表面科学会 (予定, 順不同)

期日 平成21年9月 7日(月, 第1日)
8日(火, 第2日)

会場 東京大学山上会館
(http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam01_00_02_j.html, 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1 Tel 03-5841-2320)

概要

原子レベルのシミュレーションは, 実験による測定が困難なマイクロなレベルの材料の解析が出来る可能性を秘めており, 材料開発や現象の理解等に関して様々な応用が期待されている. また, 近年では, ノートパソコンでも容易にシミュレーションが可能な環境が整って来ている. さらに, 高度な知識を持たなくとも, 操作が可能なソフトウェアが開発されて来ている. 本講習会では, “原子レベルのシミュレーションに興味はあるが, 敷居が高く踏み切れなかった人” や “原子レベルのシミュレーションを体験し, 自分の仕事に役に立つかどうか試して見たい人” 等を対象にして, 実際の原子レベルのシミュレーションを体験してもらうことを目的としている. 2日間の講座からなり, 1日目は“分子動力学計算の体験”, 2日目は“電子状態計算の体験”である. それぞれの講座は, シミュレーションを実行する上で必要な最低限の知識の講義と, 受講者自身のノートパソコンで行うシミュレーション実習からなっている.

※本講習会は日本材料学会 CPD 企画です.

スケジュール:

1日目:

10:00-11:00 講義1 (分子動力学の基礎・物性値算出)

東京大学 泉 聡志

分子動力学法をはじめの初心者を対象に, 分子動力学法を使用するために最低限必要な知識・データの分析方法について概説する. 動径分布関数などの構造解析, 温度などの統計量および拡散係数などの輸送係数の算出方法, 応力テンソルなどの連続体力学量の評価方法, を中心に説明する.

11:00-15:30 分子動力学ソフト"Materials Explorer"演習

富士通株式会社バイオIT事業開発本部
(1時間の休憩を含む)

1. Materials Explorer5.0 のご紹介
2. Materials Explorer5.0 の基本操作習得
3. 「鉄の応力印加」のシミュレーション
EAM ポテンシャル(Finnis Sinclair ポテンシャル)の使用, 応力印加の仕方などやや高度な操作の演習を行う
4. 分子動力学のモデリング・事例紹介

15:30-16:30 講義2 (分子動力学のポテンシャル)

東京大学 泉 聡志

分子動力学で使われる二体ポテンシャル, 金属系のためのFS, EAM ポテンシャル, 共有結合系のためのボンドオーダーポテンシャル, イオン結合系のためのイオンポテンシャルなどを紹介し, 適用時の選定基準などを概説する.

16:30-17:00 質問受付, 事例紹介

17:30-19:00 懇親会

2日目:

10:00-12:00 講義3 (電子状態計算の基礎)

大阪大学 尾方成信

13:00-16:00 電子状態計算演習・

電子状態計算ソフト (ABINIT 等) の紹介

大阪大学 尾方成信, 大阪大学 君塚 肇

近年, 材料研究にも広く用いられるようになった, 平面波基底を用いた密度汎関数法に基づく電子状態計算法の理論と, 実際にどのように数値計算が実現されているかについて解説する. また演習では, 各種計算パラメーターの決定, 表面・界面・力学特性などの計算対象に対するモデル作成, 計算の実行, データ処理の手順までを具体的に扱う.

16:00-17:00 分子動力学・電子状態計算質問・

フリーディスカッション (個別相談も応じます)

*演習にはご自分のノートパソコン (WindowsPC OS 2000/XP/VISTA, CPU 600MHz以上, メモリ 1GB以上, HDD 空き 500MB以上, 5GB以上のUSBメモリ等の外部メモリ (HDDに6GB以上空きがあれば不要)) をお持ちください. 事前にソフトウェアのインストールを行い動作確認していただく必要があります. ソフトウェアの入手方法, 及びインストール手順は, 分子動力学・電子状態計算共に, 申し込み後に個別に連絡いたします.

定員 30名程度 (定員を超過した場合はご遠慮頂く場合があります. 同一団体からの重複参加, 受講日数によって調整させていただきます.)

参加費 (テキスト費含む, 会員は協賛団体会員を含みます)

一日のみ受講の場合:

会員 : 一般 10,000円 学生 5,000円

非会員 : 一般 21,000円 学生 10,500円

二日とも受講の場合:

会員 : 一般 15,000円 学生 7,500円

非会員 : 一般 26,000円 学生 13,000円

申込締切日 平成21年8月7日 (金)

テキスト 資料当日配布

申し込み方法 ホームページ (<http://www.jsms.jp>) からお申し込み頂き, 銀行振込または郵便振替で参加費をお支払い下さい. 請求書等の書類が必要な方はその旨お知らせ下さい. なお, ホー

ムページにアクセス出来ない方は参加申込書（随意用紙）に氏名、勤務先、郵便番号、住所、電話／FAX番号、連絡用E-mailアドレス、所属学会、希望する受講日数・受講日、参加費の支払い方法（銀行振込または郵便振替）をご記入の上E-mailもしくはFAXでお申し込み下さい。

受講の可否は申し込み締め切り後にこちらから連絡いたします。

申込先 〒606-8301 京都市左京区吉田泉殿町 1-101
日本材料学会「第6回分子動力学講習会」係
TEL:075-761-5321 FAX:075-761-5325
E-mail: jimu@jsms.jp
銀行振込：みずほ銀行出町支店 普通 No.1005419
郵便振替：01000-1-26625
口座名義 社団法人 日本材料学会

[ご注意]

1. 参加者には参加証をお送りしますので、会期中にご持参ください。
2. 演習にはノートパソコンの持ち込み及び事前のソフトウェアのインストールが必須ですので、上記の注意をよくお読みの上準備願います。こちらでPCを用意することはできませんのであらかじめご了承ください。詳細は申し込み後に個別に連絡いたします。
3. 講師その他のやむを得ない事情により、プログラム、講義内容に一部変更が生じる場合があります。
4. 参加費の払い戻しは基本的にいたしません。

※ 講習会参加申込みの際にお届けいただいた個人情報は、参加証等の送付、諸連絡、行事案内等の日本材料学会の事業運営のみに使用させていただきます。

