

# 第16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://m3.jsms.jp/course.html>)

開催日 2019年11月14日(木), 15日(金)

**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, 日本表面真空学会(予定, 順不同)

**期日** 2019年11月14日(木, 第1日)  
15日(金, 第2日)

**会場** 株式会社島津製作所 関西支社マルチホール  
(<https://www.shimadzu.co.jp/aboutus/company/access/kansai.html>, 梅田阪急ターミナルビル 14F) (大阪市北区芝田 1-1-4, Phone: 06-6373-6522)

## 概要

分子動力学計算, 電子状態計算等の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材料内のミクロなレベルの情報を抽出できる可能性を秘めており, 物性発現の理解や材料設計等に関して様々な応用が期待されている. 近年では, 関連分野のシミュレーションソフトウェアの汎用化が進み, 専門的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きている. また, 価格性能比の良い計算機が比較的手軽に導入できるようになり, 容易にシミュレーションが行える環境が整ってきている.

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方”や“原子レベルのシミュレーションに触れて, 自分の仕事に役に立つかどうか試してみたい方”等を対象にして, 実際に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. 本講習会は二日間の講座からなり, 一日目は“分子動力学計算”, 二日目は“電子状態計算”を取り上げる. 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基礎知識に関する講義と, 受講者自身のノートパソコン上で行うシミュレーション演習から構成される. なお, 分子動力学計算および電子状態計算の演習では, オープンソースソフトウェアであるLAMMPSおよびABINITをそれぞれ使用する.

## 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"LAMMPS"演習

東京大学 高本 聡  
(1時間の休憩を含む)

1. LAMMPSの基本操作
2. 演習1「Feの弾性定数を求める」
3. 演習2「アモルファスSiの二体相関関数を算出する」
4. 演習3「拡散係数の求め方」
5. 演習4「カーボンナノチューブの座屈変形」  
(演習内容は進行状況によって変更されることがあります)

15:30-16:45 講義2 (分子動力学ポテンシャルと分子動力学の実践的知識と応用)

東京大学 泉 聡志

演習で用いる分子動力学ポテンシャルの原理・使い方などについて解説する. 分子動力学を用いる際に必要な実践的知識及び様々な応用例について紹介する.

16:45-17:00 質問, フリーディスカッション

17:00-18:00 交流会 (フリーディスカッション)

## 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

13:00-16:30 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 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挙げる.

16:30-17:00 電子状態・分子動力学計算質問・

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 (OS Windows 10/8.1/7 64ビット版 (32ビット版は不可), CPU 1.4GHz以上, メモリ 4GB以上, HDD 空き 16GB以上 (または, 同容量以上のSSD, USBメモリ等の外部記憶装置)) 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をしていただく必要があります. ソフトウェアの入手方法, およ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ご連絡いたします.

**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 22,000円 学生 11,000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 30,000 円 学生 15,000 円

**申込締切日** 2019 年 10 月 4 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 にて下記申込み先ま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 16 回分子動力学講習会」係

TEL: 075-761-5321 FAX: 075-761-5325

E-mail: [jimu@jsms.jp](mailto: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 公益社団法人 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。