

第 20 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～

(<https://m3.jsms.jp/index.html>)

開催日 2023 年 12 月 7 日(木), 8 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, 軽金属学会 (予定, 順不同)

期日 2023 年 12 月 7 日 (木, 第 1 日)
8 日 (金, 第 2 日)

会場 対面(日本材料学会 〒606-8301 京都市左京区吉田泉殿町 1-101) とオンライン(Zoom)のハイブリッド形式

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来ている. 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 “電子状態計算”, 二日目は “分子動力学計算” 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.

現地参加の場合は, 後述するソフトウェアをインストールしたノートパソコンを持参いただきます. オンライン参加の場合は, 手元にソフトウェアをインストールしたパソコンをご用意いただき Zoom で参加いただきます.

スケジュール:

1 日目:

10:00-12:00 講義 1 (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

名古屋大学 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を行う.

16:30-17:00 電子状態・分子動力学計算質問・
(個別相談も応じます)

2 日目:

10:00-11:00 講義 2 (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

株式会社 Preferred Networks 高本 聡,
東京大学 榊間大輝
(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)

15:30-16:30 講義 3 (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.

16:30-17:00 電子状態・分子動力学計算質問・
(個別相談も応じます)

*オンラインで受講される場合は Zoom が動作する安定したネットワーク環境, マイク, Web カメラをご用意ください.

*演習にはご自分のノートパソコンもしくはデスクトップパソコン (OS Windows 10/8.1 64 ビット版 (32 ビット版は不可, Windows 11 は動作保証外), 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)) が必要です. 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ございます)

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。申し込み状況によっては、オンライン参加をお願いする場合があります。)

参加費（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 15,000 円 学生 7,500 円

非会員：一般 30,000 円 学生 15,000 円

二日とも受講の場合：

会員：一般 25,000 円 学生 12,500 円

非会員：一般 40,000 円 学生 20,000 円

申込締切日 2023 年 11 月 24 日（金）

テキスト PDF 配布

申し込み方法 ホームページ (<https://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、対面かオンラインの希望、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 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 20 回分子動力学講習会」係
TEL: 075-761-5321 FAX: 075-761-5325

E-mail: jimu@office.jsms.jp

銀行振込: 三菱 UFJ 銀行出町支店 普通 No.0006978

三井住友銀行四条支店 普通 No.1002445

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. 演習には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。
2. 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。
3. 参加費の払い戻しは基本的にいたしません。
4. 講習会への参加は、申込 1 件につき 1 名です。参加に必要な URL 等の情報は他者に漏らさないでください。また、不特定多数がいる場所でのご参加は避けてください。
5. 講習会画面の録画あるいは撮影、音声の録音等の行為は硬くお断りします。

※ 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。