
2015 名工大 夏期レクチャーコース I のご案内

材料開発者のための原子論的シミュレーション

～ 電子状態計算と古典分子動力学計算への入門から応用まで ～

と き／2015年8月3日(月) 9:30～17:30

と ころ／名古屋工業大学 2号館 611B 教室 (名古屋市昭和区御器所町)

対 象／材料開発のために、電子・原子を直接扱うシミュレーション技術を
これから学び、活用していきたいと考えている方

レクチャー講師／

尾形 修司 名古屋工業大学大学院 創成シミュレーション工学専攻 教授

田村 友幸 名古屋工業大学大学院 創成シミュレーション工学専攻 助教

小林 亮 名古屋工業大学大学院 創成シミュレーション工学専攻 助教

河野 貴久 東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター 特任研究員
(CMSI 研究員)、名古屋工業大学 協力研究員

ご案内

コンピューターシミュレーションは、連続体スケールでの構造力学や流体力学計算を中心に、開発経費・時間を削減できるメリットから"ものづくり"企業において利用されています。しかし本来シミュレーションは、人の感覚では判別できないようなナノメートルスケールでの現象を解明したり予測したりする際に、その真価を発揮します。本レクチャーコースは、材料開発に役立てるために、電子・原子を直接扱うシミュレーション技術をこれから学び利用していきたいと考えている方々を対象としています。最初に、①電子・原子の視点から材料開発を行うために必要な統計力学の基礎をおさらいし、②近年発展著しいスパコン活用方法を紹介します。そして、③原子の動きを解析する分子動力学法の基礎と最近の発展、材料開発への応用例、また、④電子を直接扱う電子状態計算の理論的基礎から工学的応用までをわかりやすく説明します。

参加申込みについて【お申込期限 2015年7月22日(水)】

参加申込書(最後のページ)に必要事項をご記入の上、FAXにてお申込み下さい。

もしくはE-mailにて、①会社名 ②参加者氏名 ③所属 ④連絡先(TELおよびメールアドレス)をご記入の上、kyoryoku-pal@adm.nitech.ac.jp までお申込み願います。

お申込み受付け後、参加証とともに請求書を、連絡担当の方宛にお送りいたします。定員(25名)になり次第、締め切らせていただきます。

※申込取消は7月31日(金)迄にご連絡下さい(当日以降はキャンセル代を頂戴いたします)。

主催／名古屋工業大学研究協力会 協力／名古屋工業大学産学官連携センター

レクチャー講師紹介（順不同）

尾形 修司（おがた しゅうじ）

名古屋工業大学大学院 創成シミュレーション工学専攻 教授

研究分野：スパコン活用型の電子状態・原子ダイナミクス等の計算法とそのプログラムコード化、大規模シミュレーションの実施

田村 友幸（たむら ともゆき）

名古屋工業大学大学院 創成シミュレーション工学専攻 助教

研究分野：計算材料科学

小林 亮（こばやし りょう）

名古屋工業大学大学院 創成シミュレーション工学専攻 助教

研究分野：計算物性、材料科学

河野 貴久（こうの たかひさ）

東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター 特任研究員（CMSI 研究員）、

名古屋工業大学 協力研究員

研究分野：計算物性、スパコン利用に向けたコード開発

参考 / <http://locs.bw.nitech.ac.jp/>（研究室の WEB ページ）

レクチャースケジュール

8月3日（月）	
9:30 ~ 9:45	【はじめに】 ・ 講師紹介
9:45 ~ 11:00	【レクチャー 1】 ・ レクチャー全体の概要 ・ 統計熱力学の基礎 ・ 分子動力学シミュレーションの目的
11:15 ~ 12:00	【レクチャー 2】 ・ スパコン利用への入門 ・ スパコン利用に向けたアプリケーションの高速化
12:00 ~ 13:00	昼食・休憩
13:00 ~ 15:00	【レクチャー 3：古典分子動力学（MD）計算】 ・ MD 計算の概要 ・ 材料研究・開発で使える MD 計算の解析手法 ・ 材料研究・開発における MD 計算の応用例
15:15 ~ 17:30	【レクチャー 4：電子状態計算】 ・ 固体の電子状態計算の基礎論 ・ 固体の電子状態計算の実際の例

講義内容の解説

本レクチャーコースでは、固体の電子状態計算と古典分子動力学（MD）計算の講義を行います。

【統計熱力学の基礎】

ものづくり産業の持続的な発展には、新しい材料の開発が欠かせません。はじめに、材料が原子からできていることを意識して熱力学を定式化しなおした統計熱力学を、実感を持って理解できるように説明します。さらに、統計熱力学を意識して初期設定し実行する分子動力学シミュレーションは、材料を原子スケールから解析し設計するための強力なツールとなることを示します。

【スパコン利用入門】

大規模・高精度のシミュレーション実行や実行時間の短縮のため、高い計算性能を持つスパコンが利用されます。近年のスパコンは多数の計算機ノードを並列につなげた並列計算機であり、スパコンを活用するには多数のプロセッサを並列に効率よく利用するアルゴリズムが要求されます。スパコン利用への入門として、スパコンの現状と分子動力学シミュレーションの並列化などについて紹介します。

【古典分子動力学 (MD) 計算】

原子間に働く力を適切な関数で近似し、多数の原子のダイナミックスを追うことで、材料内部で生じる動的な現象を再現することができ、そこからマクロな物理量を得ることができます。長年の研究により、非常に高精度な原子間ポテンシャルが開発され、また近年の計算機能力の向上により億を越える原子数のシミュレーションも可能になってきています。今後、さらに微細化が進むナノスケール材料の設計・開発において、重要なツールとなると予想されます。これらの MD 計算の基礎、材料研究で使える解析手法とそれらの応用例について紹介します。

【固体の電子状態計算】

材料の多様な特性を決定するのは究極的には原子間結合の担い手である電子です。電子の振る舞いを正確に把握することによって新規デバイス機能の理論予測も可能です。固体材料に限定して電子状態のシミュレーション技術の基礎をわかりやすく説明します。また、実際の入力例を示し、シミュレーションを実行する際の注意事項についても説明します。

参加費（1名あたり）

- ・ 研究協力会会員会社 17,000 円（消費税込み）[資料代を含む]
- ・ 非会員会社 22,000 円（消費税込み）[資料代を含む]

個人情報の取り扱いについて

- ・ 参加申込書でご提供頂いた個人情報は、国立大学法人名古屋工業大学の個人情報保護方針に準じて、安全かつ厳密に管理いたします。
- ・ 個人情報は、本講座の参加申込み手続きに関する事務手続きのみに使用いたします。但し、当研究協力会からのセミナー・講演会等のご案内に使用することがあります。
- ・ 個人情報は、第三者に開示、提供、預託することはありません。
- ・ 個人情報の開示、訂正、削除については、研究協力会までご相談願います。

名古屋工業大学研究協力会 行 FAX (052) 735-5538

名工大夏期レクチャーコース I

「材料開発者のための原子論的シミュレーション

～電子状態計算と古典分子動力学計算への入門から応用まで～」 参加申込書

組織名		
所在地	〒 -	
連絡担当者	ご所属・お役職	お名前
	TEL () -	メールアドレス

下記のとおり参加申込みいたします。

No	お名前	ご所属・お役職	メールアドレス
1	フリガナ		
2	フリガナ		
3	フリガナ		
4	フリガナ		
5	フリガナ		

参加費 < 17,000 円(研究協力会会員会社)・22,000 円(非会員会社) × 名 = 計 円 >

名古屋工業大学への交通アクセス	お問合せ・申込先
<p>名古屋駅から【JR 東海】 ▶所要時間約 10 分</p> <p>● JR 中央本線「多治見・中津川」方面行きに乗り、「鶴舞」駅下車 名大病院口（電車の進行方向の突き当たりの出口）から東へ 500m</p> <p>名古屋駅から【地下鉄】 ▶所要時間約 10 分</p> <p>● 東山線「伏見」駅のりかえ、鶴舞線「鶴舞」駅下車 4 番出口から東へ 500m</p>	<p>名古屋工業大学研究協力会</p> <p>〒 466-8555 名古屋市昭和区御器所町</p> <p>名古屋工業大学</p> <p>産学官連携センター 18 号館 3 階</p> <p>Tel & Fax : 052-735-5538</p> <p>E-mail : kyoryoku-pal@adm.nitech.ac.jp</p> <p>担当 / 上野・鶴見</p>