

国立大学法人 豊橋技術科学大学

平成 28 年度社会人向け実践教育プログラム

計算技術科学実践教育プログラム 計算物質科学実践セミナー

主催：豊橋技術科学大学 電気・電子情報工学系，情報・知能工学系，環境・生命工学系
共催：社会連携推進センター，情報メディア基盤センター

趣旨

豊橋技術科学大学では，スパコンを含む高速コンピュータを利活用できるシミュレーション技術者の育成に取り組んでいます。特に，本学が得意としている物質・材料の研究開発分野では，高度なシミュレーション技術を用いた物質・材料設計が行われるため，それらのアプリケーションを使いこなす必要があります。

そこで，本学のミニスパコンである広域連携クラスターを使用し，高精度シミュレーションを行うアプリケーションを実践的に活用するために「計算物質科学実践セミナー」を開催します。本セミナーを受講することで，本学の広域連携クラスターを用いた研究開発だけでなく，より大きなスパコンを利用するためのスキルも学ぶことができます。

対象

無料：本学学生（学部，大学院），本学教職員，高専生（本科，専攻科）

有料：高専教職員，一般

（高専卒，または大学理工学系学部卒程度以上の知識と経験が必要です）

定員：10 名程度

参加費：3 日間 10,000 円（ただしいずれか 1 日単位で受講の場合は 1 日あたり 5,000 円）

日程と場所

日程：2017 年 3 月 6 日（月）～8 日（水），10:30～18:00（7 日は 9:00～18:00）

場所：豊橋技術科学大学 情報メディア基盤センター 第一端末室

スケジュール

1日目 (6日)

10:30 – 12:00 Quantum Espresso を用いた第一原理計算入門①

13:00 – 14:30 Quantum Espresso を用いた第一原理計算入門②

講師：谷林 慧 (一関高専)

14:40 – 16:10 ソフトマターのための統合シミュレータ OCTA の活用①

16:20 – 17:50 ソフトマターのための統合シミュレータ OCTA の活用②

講師：小沢 拓 ((株)JSOL)

2日目 (7日)

9:00 – 10:20 Materials Studio 入門と Ver2017 R2 の新機能の紹介

10:30 – 12:00 Materials Studio Visualizer 入門

13:00 – 14:30 Materials Studio を利用した物性解析 CASTEP ①

14:40 – 16:10 Materials Studio を利用した物性解析 CASTEP ②

Materials Studio を利用した物性解析 DMol3 ①

16:20 – 17:50 Materials Studio を利用した物性解析 DMol3 ②

講師：Abhijit Chatterjee (ダッソー・システムズ・バイオビア(株))

3日目 (8日)

10:30 – 12:00 Gaussian による分子構造とスペクトル, 反応解析①

13:00 – 14:30 Gaussian による分子構造とスペクトル, 反応解析②

講師：小口達夫 (豊橋技科大)

14:40 – 16:10 CONFLEX を用いた結晶構造予測と解析①

16:20 – 17:50 CONFLEX を用いた結晶構造予測と解析②

講師：小畑繁昭 (豊橋技科大)

セミナー概要：

『Quantum Espresso を用いた第一原理計算入門①』	
谷林 慧 一関工業高等専門学校 電気情報工学科 准教授	
Quantum Espresso はオープンソースの第一原理電子状態計算プログラムです。最初に第一原理計算の基本概念（バンド構造、平面波基底、擬ポテンシャル、SCF 計算等）を簡単に説明します。次に、グラフェンを例として、入力ファイルの作成方法、擬ポテンシャルファイルの準備方法、SCF 計算の実行方法を具体的に説明します。次に計算結果からの可視化の方法（バンド構造、DOS(状態密度)、電荷密度等) およびその見方を説明します。最後に、収束性や精度についての技術的内容および構造最適化についても触れます。	
アプリケーション名	Quantum Espresso

『ソフトマターのための統合シミュレータ OCTA の活用』	
小沢 拓 (株)JSOL エンジニアリングビジネス事業部	
OCTA はソフトマターのシミュレーションをターゲットにしたオープンソースのソフトウェアで、分子動力学法から連続体の有限要素法までのマルチスケールシミュレーションが可能です。本セミナーではフリー版 OCTA および商用版 J-OCTA の概要と事例紹介の後、フリー版 OCTA を用いた簡単な解析を体験します。OCTA を使うのに必要な基本知識、Python の活用方法などを解説します。	
アプリケーション名	OCATA, J-OCTA

『Materials Studio 入門～Materials Studio を利用した物性解析』	
Abhijit Chatterjee ダッソー・システムズ・バイオピア(株)	
本講義では、Materials Studio (MS) の入門編として、MS の機能について学習するとともに、Visualizer, CASTEP, DMol3 の利活用方法を実習する。特に、MS を利用した結晶物性解析として、CASTEP によるバンドギャップ、状態密度、電子密度計算や XANES 計算について学ぶ。さらに、DMol3 を用いて、遷移状態計算と反応速度計算について学習するとともに、ラマンスペクトルや UV/Vis スペクトル計算について学ぶ。	
アプリケーション名	BIOVIA Materials Studio

『量子化学計算による分子構造とスペクトル, 反応解析』

小口達夫 豊橋技術科学大学 環境・生命工学系 准教授

本講では, 比較的小さな孤立分子系を対象として, 量子力学原理 (第一原理) に基づいた量子化学計算の手法を用い, 安定分子構造の探索, 赤外・ラマン分光法との対応, 分子熱力学的物性値 (生成エンタルピー, 結合解離エネルギーなど) の予測, といった実験と対応づけられる情報の取得法を解説します. 後半では, 実際にコンピュータを用いた計算演習を行い, 出力ファイルの読み方等を解説します.

アプリケーション名	Gaussian
-----------	----------

『結晶構造予測と解析』

小畑繁昭 豊橋技術科学大学社会連携推進センター 特任助教

本講義では, 有機化合物が形成する分子性結晶を対象に, その立体配座の生成, 結晶多形構造の探索, 安定な結晶構造の予測までの一連の手法を習得できます. また, 実験において解析困難な結晶構造であっても回折パターンが得られている場合に, 結晶構造を推定する手法についても学びます.

アプリケーション名	CONFLEX
-----------	---------