

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

日時: 2017年3月6日(月)～3月8日(水)

会場: 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

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: 豊橋技術科学大学 社会連携推進センター／情報メディア基盤センター

## <テーマ> 「計算物質科学実践セミナー」

3/6(月) 1日目: 『Quantum Espressoを用いた第一原理計算入門』

『ソフトマターのための統合シミュレータOCTAの活用』

3/7(火) 2日目: 『Materials Studioを利用した物性解析』

3/8(水) 3日目: 『Gaussianによる分子構造とスペクトル、反応解析』

『CONFLEXを用いた結晶構造予測と解析』

<対象者> 本学学生(学部、大学院)、高専生(本科、専攻科)、本学教職員、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> 一般の方:3日間10,000円 (ただしいずれか1日単位で受講の場合1日あたり5,000円)  
※受講希望日を選択しお申込みください。お支払い方法は受講者に別途連絡します。

## <概要>

豊橋技術科学大学は、開学以来、「技術」を「科学」で裏付けし、そこから新しい技術を創造する技術科学の教育・研究を使命としています。計算機によるシミュレーションは、まさにこの理念を実践する上で不可欠な技術であることから、平成24年度より「次世代シミュレーション技術者教育プログラム」を開始し、我が国の産業の強化・活性化に欠かせない次世代シミュレーション技術を「使いこなせる」、「開発できる」人材を育成してきました。

この新たなプログラムでは、これまで開発してきた教育カリキュラムや教材開発ノウハウを最大限に活用し、大学院生(修士・博士)向けの講義科目(実習を含む)や様々な高度アプリケーション講習会を社会人の学び直しの機会として公開します。この「計算物質科学実践セミナー」では、物質・材料の研究開発分野のシミュレーション・アプリケーションを実践的に利活用するための基礎技術を学ぶことができます。また、本学の広域連携クラスターの利用を通して、より大きなスーパーコンピュータを利用するためのスキルも学ぶことができます。

尚、各コース科目を所定の成績を取めた参加者に認定書が授与されます。

## 【申込み方法】

別紙「参加申込書」に内容を明記の上、E-mail(研究支援課 社会連携支援室 jinzai@office.tut.ac.jp 0532-81-5188)

にてお申込ください。応募者が定員(10名)を越える場合は主催者側で受講者を選考させていただきます。

尚、関係資料は下記サイトからダウンロード可能です。

<http://www.sharen.tut.ac.jp/> (社会連携推進センターホームページ 新着情報)

**申込み期限** 2017年2月28日(火) 必着

# 開講スケジュール

日程	時間	科目名	講師
3月6日(月)	10:30～12:00	Quantum Espressoを用いた第一原理計算入門①	谷林 慧 (一関高専)
	13:00～14:30	Quantum Espressoを用いた第一原理計算入門②	
	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	小沢 拓 ((株)JSOL)
	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	
3月7日(火)	9:00～10:20	Materials Studio入門とVer2017 R2の新機能の紹介	Abhijit Chatterjee (ダッソー・システムズ・ バイオビア(株))
	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	
3月8日(水)	10:30～12:00	Gaussianによる分子構造とスペクトル, 反応解析①	小口 達夫 (豊橋技科大)
	13:00～14:30	Gaussianによる分子構造とスペクトル, 反応解析②	
	14:40～16:10	CONFLEXを用いた結晶構造予測と解析①	小畑 繁昭 (豊橋技科大)
	16:20～17:50	CONFLEXを用いた結晶構造予測と解析②	