1 公益社団法人 応用物理学会 薄膜·表面物理分科会主催

第41回 薄膜-表面物理基礎講座(2012)

協賛:日本物理学会,日本化学会,日本表面科学会,電子情報通信学会,日本金属学会,触媒学会,精密工学会,日本結晶学会,日本磁気学会,日本セラミックス協会,日本シミュレーション学会,日本コンピュータ化学会(依頼中)

簡単に使えるようになります! 実験補完ツールとしての材料シミュレーション入門

近年のパーソナルコンピュータのマルチコア化とメモリーの大容量化,ならびに、ソフトウェアの多機能化・高性能化・ユーザビリティの向上により、より現実に近い系・条件の材料についての構造・物性が第一原理量子計算により手軽に実行できる状況にある。特に第一原理計算では、計算の近似・モデルが妥当である系について、構造パラメータで 2% 以内、反応熱・弾性物性など全エネルギーに関する物性についても数% 以内で再現・予測できるところまで精度・信頼性が向上している。このことは、材料の合成・評価を主とする実験家が、これらの材料シミュレーションを新しい実験補完ツールとして、あるいは、新材料設計ツールとして利用できることを意味している。一方で、実験家がこれら物理理論に基づくソフトウェアを使いこなすことに対しては高い心理障壁があるのではないだろうか。また、実際に使う場合にも、計算したい対象についてソフトウェアの選択、計算条件の設定、計算結果の妥当線の判断を適切に行う必要がある。

本講座では、幅広い範囲の分子・原子を対象にした材料シミュレーションについて、それらの物理的基礎、材料研究への実際の応用例についてする。一部講義では計算の実演、PCを持ち込める希望者には MS-Windows で使えるソフトウェアを用いた演習も行う。

日時:2012年10月17日(水),18日(木)

場所:東京工業大学(大岡山キャンパス) 西2号館 W242号室

(東京都目黒区大岡山2-12-1, TeL03-5734-3737, 東急大井町線・目黒線 大岡山駅下車 徒歩1分) http://www.titech.ac.ip/about/campus/o map.html (アクセスマップ)

第41回薄膜・表面物理基礎講座 ホームページ: http://conf.msl.titech.ac.jp/Conference3/TFSP2012/

1. プログラム:

日時		講演題目	講師
10 月 17 日 (水)	13:00~13:40	Introduction: 計算材料シミュレーションの現状	神谷利夫 東京工業大学
	13:40~15:10	Winmostar を利用した MOPAC と GAMMESS による分子軌法道計算の 紹介と実習(実演・実習あり)	木原寛 富山大学
	15:30~17:00	第一原理バンド計算の現状、実演と 自由実習ーPHASE を例にー (実演・実習あり)	甲賀淳一郎 アスムス
10 月 18 日 (木)	9:40~10:40	第一原理計算による熱力学パラメー タ算出の基礎と構造予測	東健司 大阪府立大学
	10:40~11:40	第一原理計算による点欠陥の特性、 ドーピングの予測	大場史康 京都大学
	11:40~12:40	第一原理計算による電荷輸送シミュレーションの現状と今後	浅井美博 産業技術総合 研究所
	13:40~14:40	第一原理計算による誘電率の計算 (実演・実習あり)	濱田智之 日立製作所
	14:40~15:40	第一原理計算による超伝導、トポロ ジカル絶縁体の計算	有田亮太郎 東京大学
	15:40~16:40	その他の計算:磁気構造、非晶質、 表面、界面	神谷利夫 東京工業大学

2. 受講費: テキスト代, 消費税を含む.

参加日数	薄膜·表面物理 分科会会員*	応用物理学会 会員·協賛学協 会会員**	学生	その他
2 日間	15,000 円	20,000 円	10,000 円	25,000 円
1日のみ	9,000円	15,000 円	6,000 円	20,000 円

- *薄膜・表面物理分科会賛助会社の方は、分科会会員扱いと致します。
- **応用物理学会賛助会社の方は、応用物理学会会員扱いと致します。
- ***現在非会員の方でも、参加登録時に薄膜・表面物理分科会(年会費A会員:3,000円、B会員:2,200円)にご入会いただければ、本基礎講座より会員扱いとさせて頂きます。

http://www.jsap.or.jp/join/kojin.html より入会登録を行い, 仮会員番号を

取得後,本基礎講座にお申込み下さい.

入会決定後,年会費請求書をお送りいたします.(年会費を 基礎講座参加費と同時にお振込なさらないで下さい)

- 3. 定員:80名 (受講費支払い順に受け付け, 満員になり次第 締め切ります)
- 4. 参加申込締切:2012年9月30日(日)
- 5. **参加申込方法**: 下記分科会ホームページ内の登録フォームにて参加登録してください.

http://annex.jsap.or.jp/tfspd/

参加登録完了後, ご連絡いただいた期日までに, 下記銀行口座に参加費をお振込みください. 原則として参加費の払い戻し, 請求書の発行は致しません. 領収書は当日会場にてお渡し致します.

6. 参加費振込期限: 2012年10月5日(金) 参加費の入金確認後, 参加証をお送りします.

7. 参加費振込先:

三井住友銀行 本店営業部(本店でも可) 普通預金 口座番号 9474715 (公社) 応用物理学会薄膜・表面物理分科会 (シャ) オウヨウブッリガッカイハクマク・ヒョウメンブッリブンカカイ

8. 企画に関する問合せ先:

東京工業大学応用セラミックス研究所 神谷利夫 Tel. 045-924-5357 FAX 045-924-5350 Email: tkamiya@msl.titech.ac.jp

9. 参加登録に関する問い合わせ先:

応用物理学会事務局 分科会担当 上村さつき TEL:03-5802-0863 FAX:03-5802-6250 E-Mail: kamimura@jsap.or.jp

10. PC持ち込み, 推奨仕様, ソフトウェアの事前インストール, 使用ライセンスについて:

上記ホームページに詳細を掲載しますので、必ず事前にご確認ください.