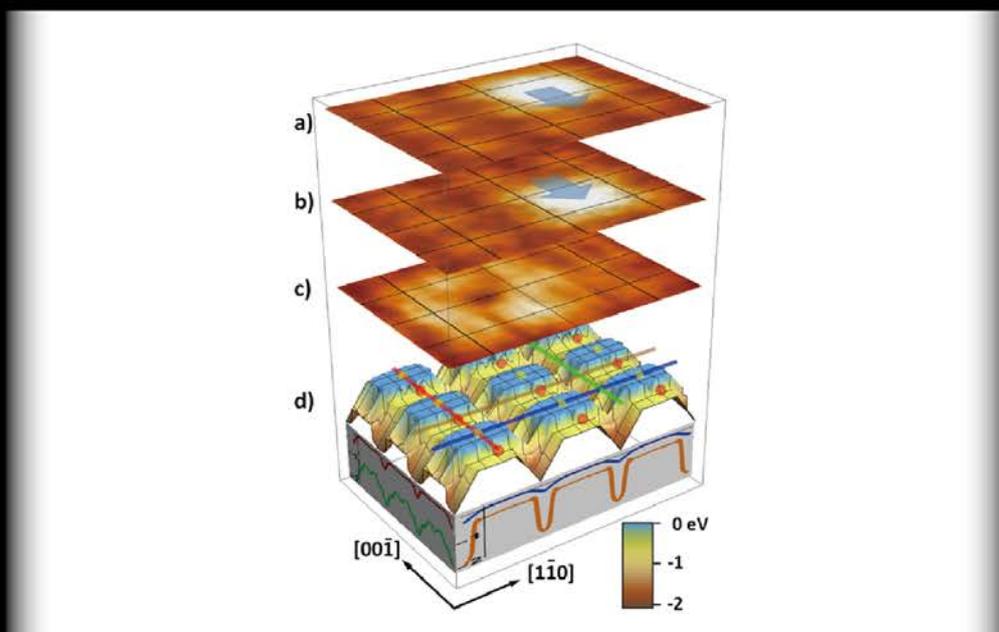


計算材料学センターだより



原子間力顕微鏡による表面上の磁性原子のスピンの制御のシミュレーション
Simulation of atomic force microscopy manipulation and mechanical spin control of a magnetic atom on a surface

CONTENTS

- ・ スーパーコンピューターの民間機関の利用制度
- ・ コンパイラ・ライブラリのバージョンアップ
- ・ アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ
- ・ AVS/Express のモジュール開発について
- ・ セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」
- ・ Atomistix ToolKit (ATK)および Virtual NanoLab (VNL)講習会の開催
- ・ SC16 に本センター技術職員が参加
- ・ スパコンユーザーのセミナーの開催

CCMS
NEWS
26

表紙の図について

■原子間力顕微鏡による表面上の磁性原子のスピン制御のシミュレーション

■ Simulation of atomic force microscopy manipulation and mechanical spin control of a magnetic atom on a surface

Calculated potential energy surface Fig. d) describing Co atom on a $p(2 \times 1)$ phase of an oxidized Cu(110) surface featuring an unusual low-temperature AFM delocalization manipulation, Fig. c), in addition to the conventional lateral manipulation, Figs. a), b). The manipulation is result of a combination of extremely flat potential energy surface due to mechanical spin control with long-range interactions introduced by Friedel oscillations of the charge densities due to other surrounding Co atoms.

□ Y. Kinoshita, R. Turanský, J. Brndiar, Y. Naitoh, Y.J. Li, L. Kantorovich, Y. Sugawara, and I. Štich, *Promoting Atoms into Delocalized Long-Living Magnetically Modified State Using Atomic Force Microscopy*, Nano Lett. (2016), DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b03203

スーパーコンピューターの民間機関の利用制度

計算材料学センターのスーパーコンピュータシステムは、全国共同利用の為に設置されたものであり、利用課題の公募、審査、採択の手順を経て、国内外の計算材料学のコミュニティのユーザーに利用をしてもらっています。しかし、計算材料学はアカデミックの基礎学問にとどまるものではなく、応用から実用までを見据えて始めて完結するものです。このような観点に立つと、材料設計、材料開発の現場における課題に対してもスーパーコンピューターの活用を図り、さまざまなフィードバックを得ることが、計算材料学センターが今後の材料科学・材料工学・物質科学分野に寄与していく上で重要なことだと思われれます。このような趣旨の下、計算材料学センターでは民間機関の利用(産業利用)に関するワーキンググループを設置し、国内の他の計算センターの状況、運用上の問題点、課金制の導入など、広範な視点から検討を行ってまいりました。そして、運営委員会の議を経て、9月の本研究所の教授会でこれに関わる課金制の導入が認められました。上に運用上の問題点と記しましたが、特に留意すべきことは、共同利用の課題遂行に影響を与えることなく、計算時間の確保を行うということです。このためには全体のノード時間を常にチェックしながら、計算機資源(ノード時間)の有効な配分を行うことが必須になります。計算材料学センターでは、定期的にユーザーの利用状況をチェックしながらノード時間の再配分を行っていますが、産業利用枠に関しましても予め割当量を確保し、この枠内で申請書の審査に基づいてユーザーを採択し、有効な活用を図っていただけるように運営を行う予定です。

平成28年12月より本制度を実施する予定です。申請の方法や課金の詳細につきましては当センターのホームページをご覧ください。

コンパイラ・ライブラリのバージョンアップ

アプリケーションサーバー

1. Intel コンパイラおよびライブラリ

Intel コンパイラおよびライブラリを Parallel Studio XE 2017 Update 1 にバージョンアップしました。今回のバージョンアップで主に次のようなパッケージが使用可能になりました。

- ・ Intel Fortran コンパイラ 17.0 Update 1
- ・ Intel C/C++コンパイラ 17.0 Update 1
- ・ Intel MKL 2017 Update 1
- ・ Intel MPI 2017 Update 1

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/index_compiler.html

Intel Parallel Studio XE の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

https://www.xlsoft.com/jp/products/intel/studio_xe/index.html

2. PGI コンパイラ

PGI Fortran, C/C++ コンパイラを 16.9 にバージョンアップしました。

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/index_compiler.html

PGI コンパイラの詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

https://www.softek.co.jp/SPG/Pgi/pgi_professional.html

アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ

スーパーコンピューター

1. Gaussian 09

量子化学計算ソフトウェア Gaussian 09 Rev E.01 をインストールしました。

Gaussian 09 では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 構造最適化計算や遷移状態計算を行うことができます。
- ・ 自由エネルギー、IR スペクトルなどの物性値を算出できます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/usage_gaussian09.html

Gaussian の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.gaussian.com/>

2. ABINIT

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである ABINIT を 8.0.8b へバージョンアップしました。

ABINIT では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 分子や周期系の電子状態計算、構造最適化計算を行うことができます。
- ・ 励起状態の計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_abinit.html

ABINIT の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.abinit.org/>

3. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 30Jul16 をインストールしました。

LAMMPS では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ ソフトマター、固体など多くの系で分子動力学計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_lammps.html

LAMMPS の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://lammps.sandia.gov/>

4. CPMD

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理分子動力学シミュレーションプログラム CPMD のバージョン 4.1 をインストールしました。

CPMD では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 密度汎関数法およびカー・パリネロ法による分子動力学計算を行うことができます。
- ・ 構造最適化計算や励起状態計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_cpmd.html

CPMD の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.cpmd.org/>

5. Quantum Espresso

擬ポテンシャルファイルと平面波基底を用いた密度汎関数法シミュレーションプログラムである Quantum Espresso のバージョン 5.4.0 をインストールしました。

Quantum Espresso では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 構造最適化計算や遷移状態探索計算を行うことができます。
- ・ 第一原理分子動力学計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_quantum.espresso.html

Quantum Espresso の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.quantum-espresso.org/>

6. HΦ

並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効模型ソルバーパッケージである HΦ のバージョン 1.1.1 をインストールしました。

HΦ では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ ランチョス法による基底状態及び低励起状態の厳密計算を行うことができます。
- ・ 熱的純粋量子状態を利用した比熱・帯磁率の温度依存性計算を行うことができます。

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_hphi.html

HΦの詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<https://github.com/QLMS/Hphi>

7. RSDFT

実空間差分法と擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算プログラムである RSDFT のバージョン 1.3.0 をインストールしました。

RSDFT では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 結晶・界面・分子などの広範な物理系に対して密度汎関数法による電子状態計算を行うことができます。
- ・ 構造最適化計算やバンド構造計算を行うことができます。

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_rsdft.html

RSDFT の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<https://github.com/j-iwata/RSDFT>

8. feram

強誘電体を対象とした高速分子動力学シミュレーターである feram のバージョン 0.24.02 をインストールしました。

feram では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 双極子相互作用を効率よく取り扱うことで、原子変位に関する分子動力学計算を高速に行うことができます。
- ・ 数十 nm の微細な強誘電性薄膜の物性を、形状や不活性層の効果などを制御しながらシミュレーションを行うことができます。

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_feram.html

feram の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://loto.sourceforge.net/feram/>

9. SMASH

大規模並列量子化学計算ソフトウェアである SMASH のバージョン 1.1.0 をインストールしました。

SMASH では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ Hartree-Fock 法を使用した閉殻・開殻のエネルギー計算及び構造最適化計算を行うことができます。
- ・ MP2 法を使用した閉殻のエネルギー計算を行うことができます。

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_smash.html

SMASH の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://smash-qc.sourceforge.net/>

10. GROMACS

生体分子向けにデザインされた分子動力学パッケージ GROMACS のバージョン 4.6.7 をインストールしました。

GROMACS では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 数百から数百万の粒子を含む分子動力学計算を行うことができます。

- ・ 温度圧力制御、長距離相互作用計算、自由エネルギー計算等を効率よく行うことができます。

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_gromacs.html

GROMACS の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.gromacs.org/>

11. OpenMX

原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラムである OpenMX のバージョン 3.7.10 をインストールしました。

OpenMX では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 密度汎関数理論に基づき、高速かつ高精度な電子状態計算を行うことができます。
- ・ 大規模系に対して分子動力学計算や構造最適化計算を行うことができます。

使用方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_openmx.html

OpenMX の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.openmx-square.org/>

アプリケーションサーバー

1. Gaussian 09

量子化学計算ソフトウェア Gaussian 09 Rev E.01 をインストールしました。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_g09.html

Gaussian 09 の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.gaussian.com/>

2. ABINIT

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである ABINIT を 8.0.8b へバージョンアップしました。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_abinit.html

ABINIT の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.abinit.org/>

3. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 30Jul16 をインストールしました。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_lammps.html

LAMMPS の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://lammps.sandia.gov/>

4. CPMD

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理分子動力学シミュレーションプログラム CPMD のバージョン 4.1 をインストールしました。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_cpmd.html

CPMD の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.cpmid.org/>

5. Quantum Espresso

擬ポテンシャルファイルと平面波基底を用いた密度汎関数法シミュレーションプログラムである Quantum Espresso のバージョン 6.0.0 をインストールしました。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_quantumespresso.html

Quantum Espresso の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.quantum-espresso.org/>

6. Materials Studio

低分子化合物、有機・無機材料、結晶、ポリマー、金属、半導体、触媒など様々な分野でモデルの構築から各種シミュレーションの実行、シミュレーションデータの解析まで行うことができるソフトウェア Materials Studio のバージョン 2017 をインストールしました。

Materials Studio では主に次のようなことを行うことができます。

- ・バンドギャップやフォノン分極曲線などを算出できます。
- ・構造最適化計算や遷移状態探索計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_ms.html

Materials Studio の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://accelrys.co.jp/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/>

7. ANSYS Multiphysics

構造、電熱、電磁場、電圧、熱流体、音響、落下／衝突などの幅広い解析機能とそれらの連成解析、さらに各種最適化設計機能を搭載した汎用有限要素法プログラムである ANSYS Multiphysics 17.0 をインストールしました。

ANSYS Multiphysics では主に次のようなことを行うことができます。

- ・構造力学、流体力学、熱伝導、電磁場など、幅広い物理現象を解析することができます。
- ・複数の要素を組み合わせた連成解析を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/app_ansys.html

ANSYS Multiphysics の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.cybernet.co.jp/ansys/>

8. Mathematica

数値計算および数式処理ソフトウェア Mathematica を 11.0.1 へバージョンアップしました。Mathematica は計算のみならず、モデリング、シミュレーション、可視化、開発、文書化、配備にも利用可能です。

Mathematica では主に次のようなことを行うことができます。

- ・数値計算や統計的データ解析を行うことができます。
- ・データの可視化やアニメーションの作成を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_mathematica.html

Mathematica の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.wolfram.com/>

9. MATLAB

数値解析プログラム MATLAB を R2016b へバージョンアップしました。

MATLAB では主に次のようなことを行うことができます。

- ・さまざまな数学的関数を用いて数値解析を行うことができます。
- ・データの可視化を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_matlab.html

MATLAB の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.mathworks.co.jp/>

10. AVS/Express

モジュールを組み合わせることによって可視化を行うことのできる、汎用の 3 次元可視化ソフトウェア AVS/Express を 8.3 にバージョンアップしました。

AVS/Express では主に次のようなことを行うことができます。

- ・さまざまなデータフォーマットの可視化を簡単な操作で行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_avs.html

AVS/Express の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.cybernet.co.jp/avs/>

11. Q-CHEM

非経験的量子化学計算の統合パッケージ Q-CHEM をバージョン 4.4 にバージョンアップしました。

Q-CHEM では主に次のような計算を行うことができます。

- ・構造最適化計算や振動解析計算を高精度で行うことができます。
- ・励起状態とイオン化状態の計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_q_chem.html

※スーパーコンピューターではバージョンアップはされていません。

Q-CHEM の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.hulinks.co.jp/software/qchem/>

12. ADF

密度汎関数法に基づく量子化学計算ソフトウェア ADF および ADF の GUI である ADF-GUI を 2016.102 へバージョンアップしました。

ADF では主に次のような計算を行うことができます。

- ・構造最適化計算や遷移状態探索計算を行うことができます。
- ・紫外・可視呼吸スペクトルやラマン強度、ファン・デル・ワールス分散係数などの計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_adf.html

ADF の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.scm.com/>

13. Atomistix ToolKit (ATK)および Virtual NanoLab (VNL)

第一原理電子状態計算ソフトウェア ATK および ATK の GUI である VNL を 2016.2 にバージョンアップしました。

ATK では主に次のような計算を行うことができます。

- ・電極間の分子やバルク系の電気伝導特性を計算することができます。
- ・構造最適化や遷移状態探索計算を行うことができます。

実行方法: http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_atk.html

ATK および VNL の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.quantumwise.com/>

AVS/Express のモジュール開発について

AVS/Expressはモジュールを組み合わせることで可視化を行うことができる汎用の3次元可視化ソフトウェアです。計算材料学センターでは、本所のスーパーコンピューティングシステムで得られたシミュレーション計算結果をAVS/Expressで可視化する際に、LASKYOまたはLAMMPSの計算結果データを読み込み、粒子が存在する位置の境界面を生成するBoundarySurfaceモジュールを開発しましたのでご利用ください。AVS/Expressはアプリケーションサーバーで利用できます。また、ご自分のPCで利用希望の方はインストールメディアが計算材料学センターにありますので、ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp までご連絡ください。サポートOSはWindows Vista以上、Mac OS 10.9-11、RedHat Enterprise Linux 6.xです。

BoundarySurface モジュールについて

BoundarySurfaceモジュールはパラメータにより定義された直行等間隔ボリューム格子内に含まれる粒子数を計算し、粒子が存在する位置の境界面を生成するモジュールで、1モジュールにつき、2境界面まで作成することができます。図1のように、黒枠の格子点に対して、赤枠点線の領域に入っている粒子数を計算し、この粒子数を黒枠の各格子点に定義します。この例では、点Aは4、点Bは7、点Cは1 になります。直行等間隔格子に対して、閾値0.5での等値面および境界部分に対して閾値0.5以上の面を生成することで、粒子の存在する境界面を生成します。BoundarySurfaceモジュールはAVS/ExpressのCCMSのLibraryにあります。図2-(1)はBoundarySurfaceモジュールの接続例です。図2-(2)はコントロールパネルで、データの読み込み形式はBinaryまたはASCIIを選択し、Type1、Type2で境界面を生成する粒子種番号を指定します。また、RGB値を変更することで境界面の色を変更できます。図3は5種類の粒子からなる構造で、2種類の粒子をまとめた境界面を赤、残りの3種類の粒子をまとめた境界面を緑で表示した例です。

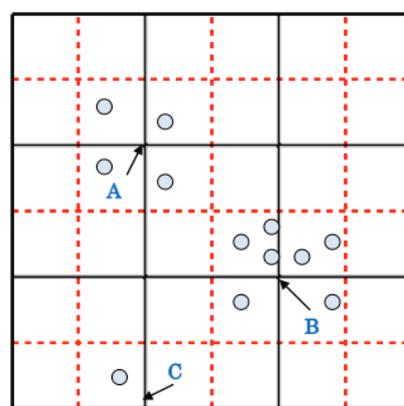


図1. 直交等間隔ボリューム格子の生成例

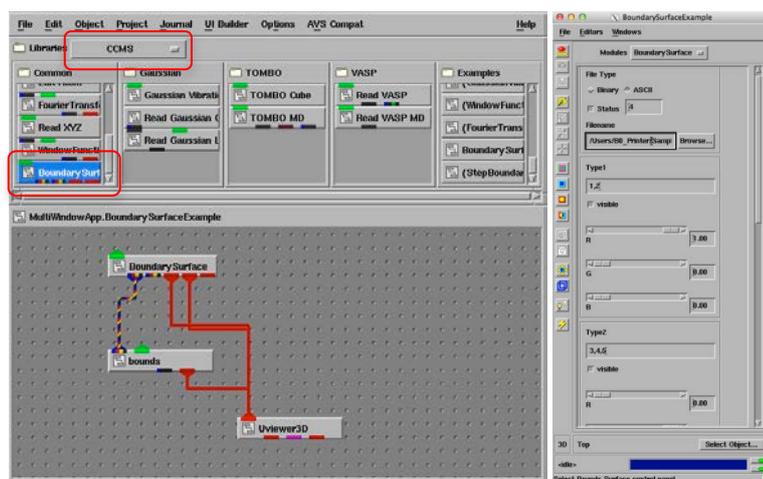


図 2. (1). BoundarySurface モジュールの接続例 (2). コントロールパネル

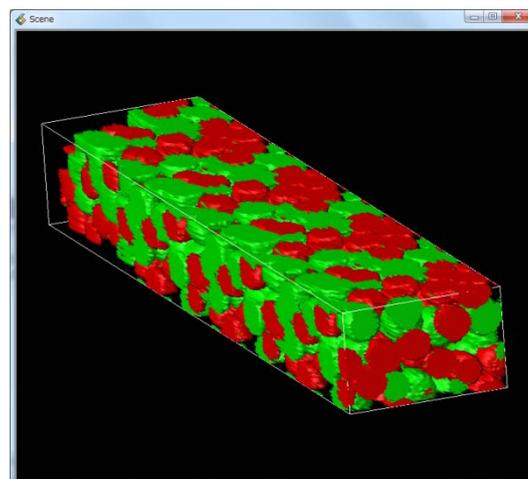


図 3. 境界面の表示例

セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」

計算材料学センターでは、次期スーパーコンピューティングシステムへの更新が近づき、これに金属材料研究所からの要望をどのように盛り込むか検討するためにアンケートを実施しました。しかしながら、アンケートの結果は、「計算材料学センターがどのようなサービスをしているのか知らない」、「計算材料学センターを知らない」といった回答が多いこと、そしてスーパーコンピューターに対しての心理的バリアが大きく、これまで利用して来なかったというものでした。計算材料学センターは、全国共同利用施設として、本邦の計算材料科学分野の発展に対して精力的に取り組んで参りましたが、一方において、身近な本所の研究に十分な貢献ができていないのではないかと反省をしています。

セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」は、このような反省に基づき、計算材料学センターを知っていただき、スーパーコンピューターの活用例を少しでも身近なものにしていただくことを目指して始めました。結晶、磁性、表界面、欠陥、照射損傷、アモルファス、半導体、超伝導、強度など広い分野から、それぞれの専門の先生方のご意見を参考にして話題と講師を選び、スパコンの応用事例を紹介して参ります。親しみやすく気軽に参加できるカフェ形式のセミナーでこれまでに下記の3回を開催いたしました。

- ・ No. 1 尾方成信先生 「材料の変形と強度に関する計算科学の最近の発展」
- ・ No. 2 寺倉清之先生 「情報統合型物質・材料研究: 解析型研究から開拓型研究へ」
- ・ No. 3 三宅 隆先生 「永久磁石の電子論」

今後毎月1回程度の開催を目指し、セミナーを実施しますので是非お越しください。これまでのセミナーの概要と今後の開催予定は下記の Web サイトから確認いただけます。

計算材料学センター セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」アーカイブス

<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/Jpn/seminar/index.html>

○今後のセミナーの予定

- ・ No. 4 伊藤智徳先生 「計算科学で識る半導体エピタキシャル成長」(2016年12月21日)
- ・ No. 5 金田千穂子先生 (2017年1月11日)
- ・ No. 6 柿本浩一先生 (2017年2月6日)

※詳細は計算材料学センターまでお問い合わせ下さい。

セミナーの様子

・尾方成信先生 「材料の変形と強度に関する計算科学の最近の発展」 (2016年9月26日)



・寺倉清之先生 「情報統合型物質・材料研究:解析型研究から開拓型研究へ」 (2016年10月19日)



・三宅 隆先生 「永久磁石の電子論」 (2016年11月11日)



Atomistix ToolKit (ATK)および Virtual NanoLab (VNL)講習会の開催

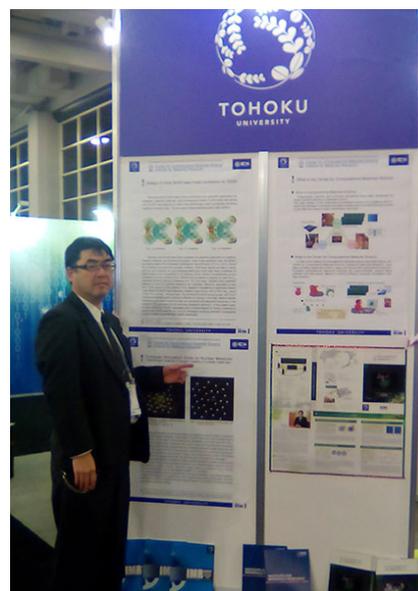
ATK はナノスケールの物質に対する、電氣的、光学的、熱力学的な特性をシミュレーションすることができ、デバイス構造に対して I-V 特性をはじめとする電子輸送特性や Electron Phonon 相互作用を考慮したデバイス特性を推算可能な第一原理電子状態シミュレーションプログラムです。VNL は ATK 用の GUI で、計算する物質の構築・計算設定・物性解析を簡便に行うことができます。本センターでは ATK および VNL をアプリケーションサーバーにインストールし、ユーザーにサービスしています。この ATK および VNL の利用促進のため、2016 年 6 月 24 日(金)にスーパーコンピュータ棟を会場として、講習会を開催しました。モデルの作成からシミュレーションの実行、結果の解析までをハンズオン形式で行い、所内外より 3 名が受講しました。



ATK および VNL 講習会の様子

SC16 に本センター技術職員が参加

2016 年 11 月 13 日(日)から 18 日(金)に、米国ユタ州ソルトレイクシティの Salt Palace Convention Center で行われた、SC16(Supercomputing Conference 2016)に、佐藤和弘技術職員が参加しました。SC は毎年行われるハイパフォーマンスコンピューティング・ネットワークング・ストレージ分野における世界最大のイベントです。このカンファレンスは各国企業、大学、研究所からの発表や展示で構成されています。今回は 352 のブース出展と 11,000 名を越える参加者がありました。東北大学からは、今年もサイバーサイエンスセンター、流体科学研究所、東北メディカル・メガバンク機構、本所が合同で展示を行いました。本センターの展示内容は、スーパーコンピューティングシステム、および、本センターの共同利用施設としての役割の紹介、そして、スーパーコンピューティングシステムを利用して得られた研究成果のパネル展示を行い、来場者への説明とパンフレットの提供などに対応しました。また、企業や他大学の展示ブースへ来訪して最新システムの情報収集などを行って来ました。



SC16 での展示と佐藤和弘技術職員

スパコンユーザーのセミナーの開催

2016年11月9日(水)スーパーコンピュータ棟を会場に Ivan Stich 氏 (Slovak Academy of Sciences, Bratislava) のセミナーを開催しました。当スーパーコンピューティングシステムのユーザーである Ivan Stich 氏に「Computational physics and chemistry at CCMS」のタイトルで講演いただきました。この研究は大規模計算を伴うものであり、計算材料学センターの技術職員も交え、手法や計算機アーキテクチャに関して意見の交換を行いました。所内外を含め 9 名の参加がありました。又、当日発表になった Stich 氏の研究の一端を表紙に紹介しました。



Ivan Stich 氏セミナーの様子

お詫びと訂正: 2016年5月19日発行の「計算材料学センターだより No. 25」8頁「平成27年度の計算材料学センター見学者」の見学者総数に誤りがありました。正しくは212名となります。お詫びして訂正致します。

計算材料学センターだより No.26

2016年12月19日(月)発行

19th Dec. (Mon.), 2016

東北大学金属材料研究所 計算材料学センター
〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平二丁目1番1号
電話 (022) 215-2411 FAX (022) 215-2166

URL <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/>
E-mail ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp



Center for Computational Materials Science of IMR,
Tohoku University
2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan
Tel: +81-22-215-2411 (DIAL-IN), FAX: +81-22-215-2166

CCMS
Supercomputing system