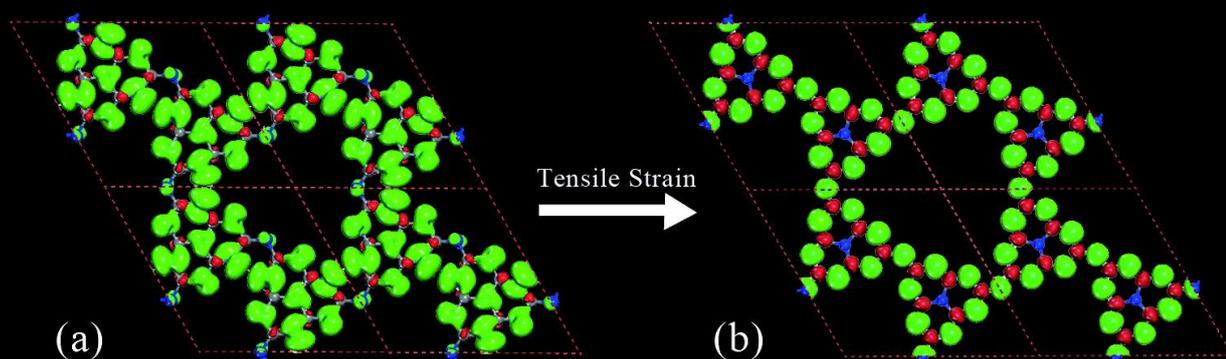


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・ センター長あいさつ
- ・ HPCI/CMSI/CMRI/
- ・ アプリケーションの紹介
- ・ アプリケーションのバージョンアップについて
- ・ AVS/Express のモジュール開発について
- ・ AVS/Express 講習会を実施
- ・ 大判 B0 プリンターの利用について
- ・ 新人職員あいさつ
- ・ 平成 25 年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日
- ・ 平成 24 年度計算材料学センター見学者

CCMS
NEWS
19

■ 磁性体に対するグラファイト型 C-N シートのカゴメ格子パターン化に関する第一原理シミュレーション

金属イオンは少なからず毒性を有しており、毒性を持たない生体親和性にとんだ磁性材料の開発が望まれています。密度汎関数理論(spin-polarized DFT)に基づく第一原理シミュレーション計算により、非磁性の $g\text{-C}_3\text{N}_4$ (グラファイト型 C_3N_4 化合物) がカゴメ構造へパターン化されると強磁性になること、さらに強磁性の $g\text{-C}_4\text{N}_3$ ではキュリー温度が 520K、磁気モーメントが 3 倍にまで増大することが見出されました。また、 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ の磁気特性は、外部から歪を加えることによってさらに向上することがわかりました。特に引張歪の印加された 2 次元のカゴメ格子は、下地の上に自己集積化などによって合成した通常のものに比べていくつかの優れた特長を備えています。図に示すのは、 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 基のカゴメ格子で、引張歪みのない状態 (a) と、引張歪みが加えられた状態 (b) で、緑および赤色は電子のスピン状態を表しています。これまでの 3 次元の磁性カゴメ格子は有毒な金属イオンを含んでいますが、この 2 次元のカゴメ格子は優れた磁気特性と安全な生体適合性を備えており、生体工学やスピントロニクスへの応用が期待されます。

■ *Ab initio* simulation on Patterning Graphitic C-N Sheets into Kagome Lattice for Magnetic Materials

Magnetic materials without metals are hotly pursued for their potential applications as biocompatible magnetic materials. Based on spin-polarized density functional theory we show that the nonmagnetic $g\text{-C}_3\text{N}_4$ becomes ferromagnetic, and the magnetism of $g\text{-C}_4\text{N}_3$ is enhanced when patterned into kagome structures, where the Curie temperature becomes 520 K and the magnetic moment per unit cell increases three-fold. Their magnetic properties can be further enhanced by applying external strain. The resulting 2D kagome structures show some advantages over the existing systems synthesized by using metal-organic coordination network or supramolecular self-assembly of specific molecules on the surface of substrates. To date, all of the two- and three-dimensional magnetic kagome structures contain metal ions and are toxic. Our studied systems with enhanced magnetism, porosity and biocompatibility are promising candidates for the applications in biotechnology and spintronics. Figures (a) and (b) are $g\text{-C}_3\text{N}_4$ -based kagome lattices without and with tensile strain. The green and red colors represent the spin up and spin down electrons, respectively.

□ Reference Xiaowei Li, Jian Zhou, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena, J. Phys. Chem. Lett. **4**, 259–263 (2013)

センター長あいさつ



計算材料学センター長
毛利 哲夫

この度、2013年4月1日より計算材料学センターのセンター長を仰せつかりました。前任は北海道大学大学院工学研究院(材料科学部門)ですが、この2年余の間、本所の計算材料科学研究拠点(文科省HPCI戦略プログラム 分野2 新物質・エネルギー創成)の運営に携わってきましたので、金研には頻繁に来る機会があり、拠点の運営を通じて新家所長を始めとする多くの先生方や職員の方々のお世話になってきました。この紙面を通じてこれまでの御支援に厚く御礼申し上げますとともに、今後の計算材料学センターを中心とする本所の計算材料科学の諸活動に変わらぬ御支援・御指導をいただきますようお願いする次第です。

これまで北大で所属していました研究室の名称は「材料数理学研究室」であり、又、北大の数学連携研究センターの兼任教員をしていましたので、計算というよりもむしろ数理的な諸側面に興味を持って材料の研究を進めてきたというのが私の研究歴です。スパコンを始めとする計算に関しては、おそらく多くのユーザーの方と同じく、決まった手順に基づいてジョブを投入し、結果を得てプログラムを修正し、又、投入するというルーチンプロセスの繰り返しをしてきただけであり、メカニズムを理解した上で計算機を使用していたわけではありません。そういった意味で、私は単なるユーザーの一人にすぎません。

本センターに着任後、センター内のいろいろなミーティングに出席する機会を得ましたが、スパコンやジョブの管理・制御に細心の注意を払いながら本センターの運営に携わっている多くの技術職員やSEの具体的な仕事に接し、非常に新鮮な気持ちでスパコンを見直すと共に、改めて支障のない運用への責任を痛感しています。あるベテラン職員の言葉ですが、「システムは生き物である」と伺いました。理屈のみならず、フィーリングとしてスパコンシステムを熟知する、あるいは、これに対峙する姿勢だと思います。巨大なシステムの運用に長年かかわってきた人のみに言える大変含蓄のある言葉と思い、センター職員の気概を感じた次第です。

スパコンの運用に関していくつかの問題を抱えています。特に、スパコンは大変電力を消費するものであり、東北電力が示唆している電力の値上げの影響を真正面から被ることになります。運営資金の毎年の低減の中で、このような事態にどのように対処するのか、これは本センター運営上の一番大きな問題と考えています。関係各位の御協力を得ながら良い解決策を見出していきたいと思っております。

又、新規のスパコンユーザーの開拓も大きな課題です。本センターのスパコンは大学の情報基盤センターのような汎用目的で設置されているものではありません。あくまでも材料科学の研究の推進の為です。しかし、現段階で材料科学の研究にスパコンを活用している例はまだまだ少ないのが現状です。この理由の一つはスパコンというものに対する心理的なバリアがあるからではないかと思っております。冒頭にも記しましたように、単なるユーザーに過ぎなかった私もこのようなバリアを経験してきました。私の視点でこのバリアを低くすることに何らかの貢献ができるのではないかと考えています。スパコンを使って「見えないものを観る」とはこの分

野のさる大先生の言葉です。さらに、「作れないものを創る」ことができれば科学から工学への本格的な活用が可能ではないかと思えます。スパコンの秘めたパワーを多くの方々に実感していただき、多くの方々にスパコンを利用した研究を展開していただきたいと願っています。

今春から若い新人も加わりセンターの職員は極めて意気軒昂です。全員一丸となって本所の、さらに本邦の材料科学の研究に資することができるように頑張っていきたいと考えています。皆様の御支援をよろしくお願い致します。

HPCI/CMSI/CMRI/

これは何かのプロトコルではない。計算材料学センターを取り巻く枢要の組織や機関の名前の略称であり、本センターに関する報告や説明において頻出するのでその背景と共に定義を記しておくことにする。

「世界で一番でなくてはだめですか?」、某国会議員のこの質問を覚えておられる方は多いだろう。いわゆる次世代スーパーコンピュータープロジェクト(以下、次世代スパコンプロジェクトと略す)の本格的な開始が間近に迫った2009年11月、事業仕分けにおいてこのプロジェクトが俎上に挙げられたときの質問である。事業仕分けの成否はともかくも、国民の税金を使って行う巨大科学というものはどうあるべきなのか、科学の世界における競争とは如何にあるべきか等、多くの問題を私達は突き付けられ、当時、この言葉は一世を風靡したかの感がある。しかし、それについて言及するのが本稿の目的ではない。この事業仕分けで一旦次世代スパコンプロジェクトは棚上げになり、新たに、次世代スパコン「京」を頂点とし、全国の大学や研究機関が有する計算機資源をも含めた国内のスーパーコンピューターインフラを構築していく方向でプロジェクトを見直すことが決められた。このインフラの中で、世界トップクラスの大規模スパコンとその他の主要計算資源をユーザーが容易に利用できる環境を構築し、本邦の科学の進展や産業競争力の強化に資すること、さらには人材育成にも貢献するというのが新しく見直されたプロジェクトの目標である。そして、このプロジェクトの正式名称が「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ」であり、その英訳名 High Performance Computing Infrastructure を略して HPCI と称されている。

HPCI は「組織作り、体制の整備」の感があり、その詳細は一般人にはなかなか分かりにくいところがある。これに対して、次世代スパコン「京」は話題性に事欠かず注目を集めがちであるが、「京」やこれに関するプロジェクトは単独に閉じたものではなく、あくまでも HPCI の中心にある超大規模スーパーコンピューターとそれを用いる HPCI プロジェクトの一環として捉えることが今後大切になってくると思われる。

さて、次世代スパコン「京」(本体は既に完成し、昨年から共用も開始されているので“次世代”の冠は適さないだろう。以降は単に「京」と記す。)を効率的に使用し、世界最先端の成果を上げる為に、文部科学省に設置された次世代スーパーコンピューター戦略委員会では平成21年に「社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる」5つの戦略分野を決定した。この5分野とは

分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤

分野2 新物質・エネルギー創成

分野3 防災・減災に資する地球変動予測

分野4 次世代ものづくり

分野5 物質と宇宙の起源と構造

であり、それぞれに戦略機関が設置されている。その内容は文科省のホームページに詳しいが、私達に直接関連するのは戦略分野2である。ここでは東京大学物性研究所が代表機関となり、物性科学、分子科学、

材料科学の戦略機関 3 研究所、ならびに 11 の協力機関を中核として、“基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ”という目標のもと、分野の壁を越えた研究組織が創られている。この組織が「計算物質科学イニシアティブ」と言われるもので、英語名が Computational Materials Science Initiative、略して CMSI である。CMSI では物質に関わる研究課題に、物性、分子、材料の研究者が分野の垣根を越えた 5 つの部会に分かれ、「京」を用いて挑戦している。又、研究のみならず教育・人材育成、分野振興にも活発に取り組んでいる。

上に CMSI を構成する戦略機関 3 研究所と書いたが、物性科学の戦略拠点が東大物性研究所、分子科学のそれが岡崎の分子科学研究所、そして材料科学が東北大学金属材料研究所であり、上述のような経緯のもと、「計算材料科学分野の先鋭的な研究を推進するとともに、次世代スパコン戦略プロジェクトの推進を通じて当該分野を振興することを目的」として、平成 23 年 4 月に金研に「計算材料科学研究拠点」が設置された。英語名を Computational Materials Research Initiative と称し、略称が CMRI である。現在、全国の大学、研究機関、企業に属する約 30 名のメンバーが、年に 2 回の全体研究会や国際会議・セミナー、講習会などを通じて活発な活動を展開しており、院生や若手教員の海外派遣などの事業も推進している。又、上に述べた CMSI の 5 つの部会の研究活動に対して、CMRI のメンバーはいくつかの部会に関わっているが、特に最近設置された第 5 部会では「マルチスケール材料科学」を部会名とし、「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」を「京」を用いる重点課題として遂行している。さらにこの部会には特別支援研究課題として「合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算」、「超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化」、「ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス」等の 3 つの材料科学に直結した課題が採択されており、次の「京」の重点活用を目指して着々と準備を進めている。さらに、東北大学は CMSI の教育を遂行する 9 つの教育拠点の一つでもあり、教育担当の准教授が CMRI に任用されている。拠点事務局は本研究所 2 号館 5 階にある。

さて、上述の HPCI のインフラには「計算資源提供機関」として 25 の研究機関が登録しており本センターもその一つである。但し昨年度から始まった共用に対しては、「京」と大学の情報基盤センターを中心にした 10 機関が参画しているのみであり、本センターのような附置研の計算センターは次のフェーズに持ち越されているようである。しかし、各計算センターが完全なスタンドアロン(単独)の運営を行った時代は徐々に過去のものとなり、今後は HPCI の枠組みや何らかの「共用」の体制下で運用することが求められると思われる。実際、CMSI 傘下の物性研、分子研の計算センターと同じく、本センターも昨年度から CMSI の共通枠に資源の 20% の供与を実施している。この実施に際しては本センター職員の努力が大であったことを記しておこう。

しかし、たとえ HPCI のインフラ下に各センターが置かれているとはいえ、それぞれのセンターの運営は設置目的・基準に基づいて行われるものであり、本センターのミッションの中核にあるのは材料科学の進展に資することであることは言うまでもない。そして材料科学のユーザーあるいは潜在的ユーザーの多くが CMRI のメンバーであることを考えれば、積極的に彼らにセンターをアピールし、本センターのスパコンを使用して成果を上げてもらうことが大切である。この場合、「京」を介した課題と本センターを用いる課題との棲み分け、あるいは整合性や関連性をどのように考えるのかが今後の大切な問題と思われる。

圧倒的な力を持つ「京」を中心とするヒエラルキーの中で各センターの特色が平滑化されてしまっただけはなるまい。本センターがきらりと光る存在感を発揮するために何を為すべきか、それは、冒頭の引用ではないが、「世界で一番でなくてはだめですか？」の命題に答えることと一脈を通じているのではなかろうか。

(文責・毛利)

アプリケーションの紹介

1. Materials Studio

Materials Studio は低分子化合物、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の研究に役立つ幅広いモジュール群から構成されており、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統一された環境で行うことができるソフトウェアです。本センターでは以下のモジュールのライセンスを所有しています。

- Visualizer: 8 ライセンス

Visualizer はモデルの構築、データやモデルの表示、シミュレーションデータの解析などを行う GUI です。

- CASTEP: 16 ライセンス

CASTEP は密度汎関数理論に基づいた第一原理量子力学プログラムで、セラミック、半導体、金属などの幅広い材料群に対して、固体、界面、および表面の特性を計算します。

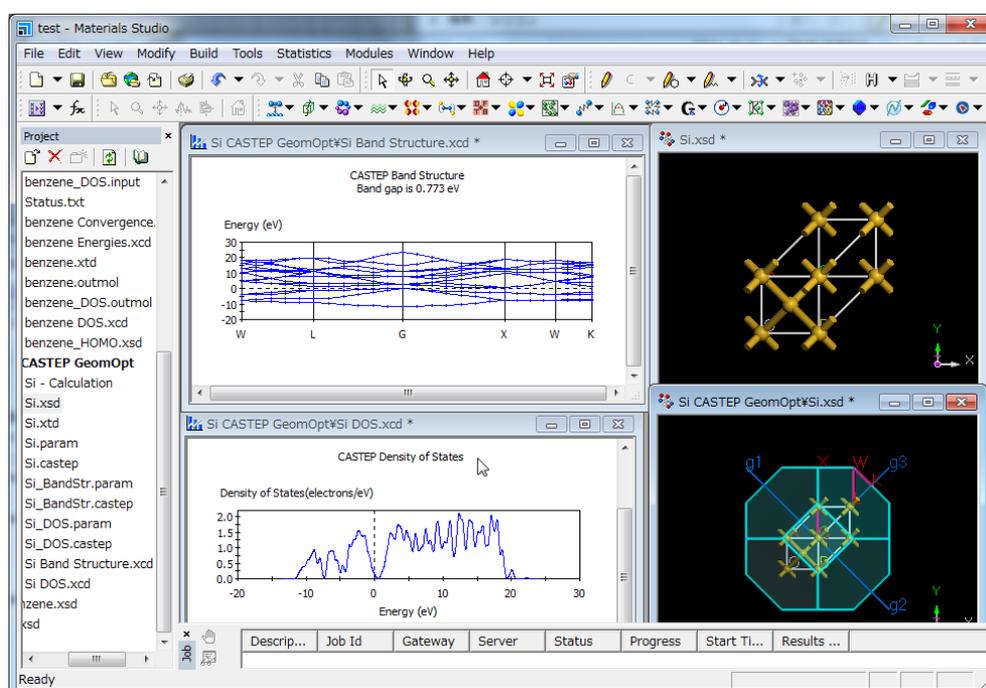


図 1. CASTEP での計算例(Si のバンド構造(左上)とDOS(左下))

- CASTEP Interface: 2 ライセンス

CASTEP Interface は CASTEP を実行する際のパラメータ設定などを行います。

- NMR CASTEP: 8 ライセンス

NMR CASTEP は NMR の化学シフトや電場勾配テンソル、等方性シフトなどを密度汎関数理論に基づき高精度で計算します。

- DMol³: 16 ライセンス

DMol³ は密度汎関数理論に基づいた第一原理量子力学プログラムで、気相、溶液、および固体におけるプロセスの予測が可能です。

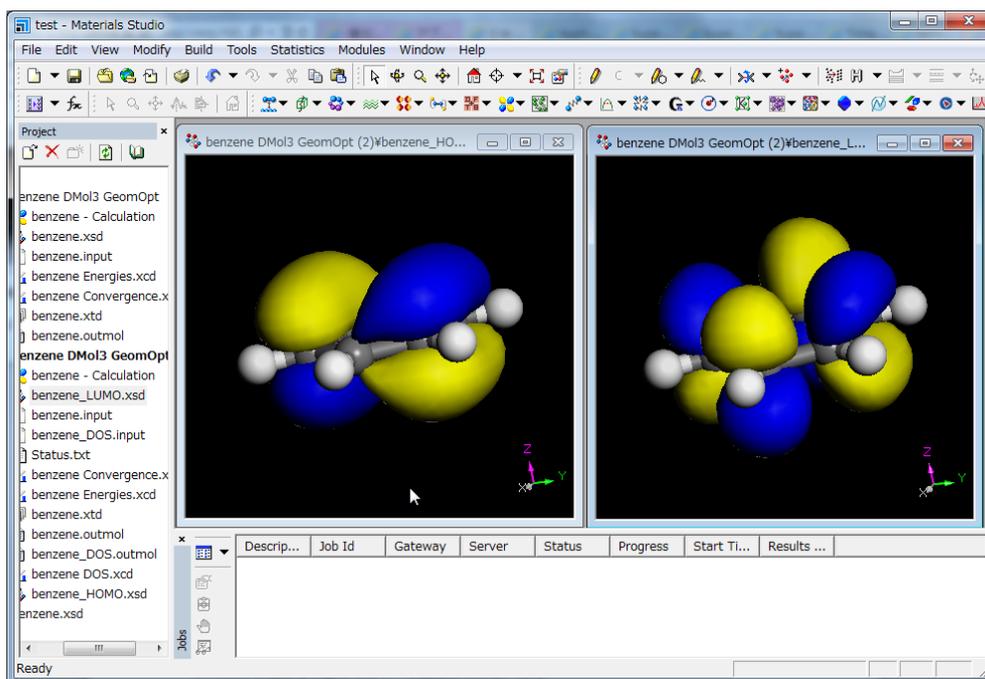


図 2. DMol³ での計算例(ベンゼンの HOMO (左)と LUMO (右))

- DMol³ Interface: 2 ライセンス
DMol³ Interface は DMol³ を実行する際のパラメータ設定などを行います。
- Discover: 3 ライセンス
Discover は広範囲な分子や素材に使える MM・MD が組み込まれており、触媒作用、分離、結晶化学とポリマー化学の分野でのリサーチなどの手助けをします。
- QSAR: 1 ライセンス
QSAR は最適な物理化学特性をもつ化合物の発見の手助けをします。
- Reflex: 1 ライセンス
Reflex は結晶物質のモデルから X 線、中性子線と電子線粉末回折パターンを計算し、結晶構造や回折データの分析の手助けをします。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_ms.html

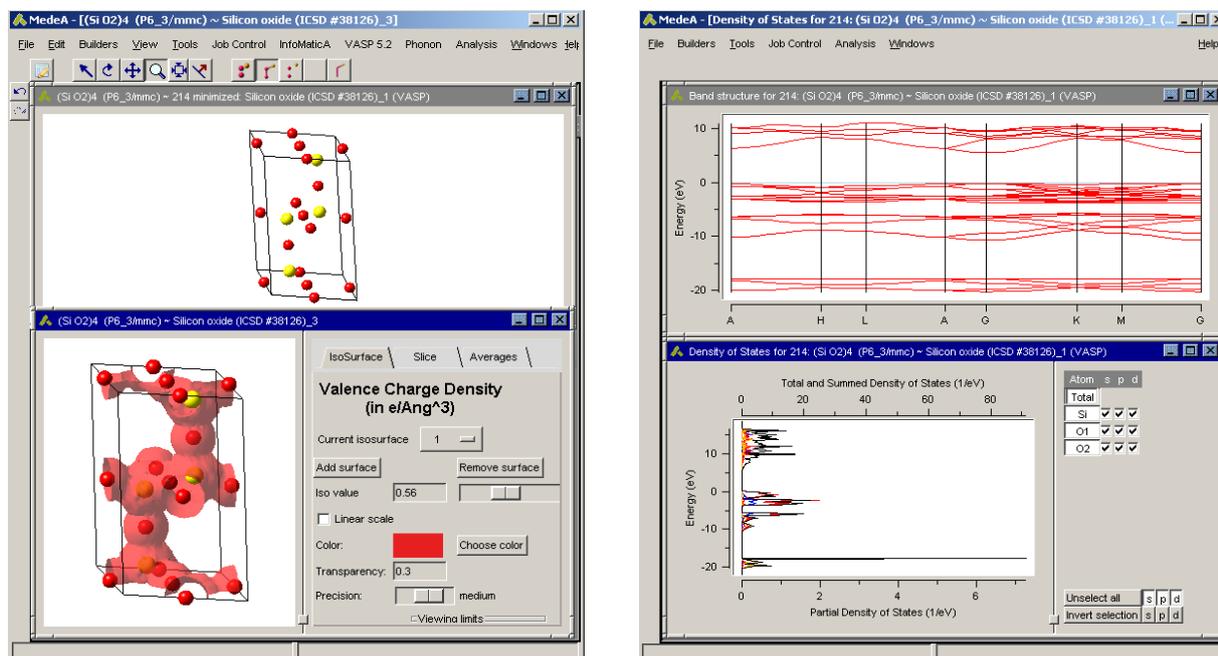
Official web site:

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/index.html>

2. Medea

Medea は、計算プログラムやその結果をもとに物性値を導くツール群から構成されており、材料設計のための統合的な計算環境を提供します。本センターでは、以下のツールを利用することができます。

- ・ データベース:InfoMaticA
結晶構造データベースから結晶構造を検索し、詳細な結晶構造を閲覧することができます。
- ・ 第一原理計算プログラム:VASP
擬ポテンシャルおよび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です。
- ・ 格子振動特性・熱力学物性評価ツール:Phonon
ダイレクトアプローチと呼ばれる方法でフォノン特性の計算を行います。



(1) SiO₂の最適化構造(上)と電荷密度(下)

(2) SiO₂のバンド構造(上)とDOS(下)

図 3. Medea-VASP での計算例

Medea 用ワークステーションはスーパーコンピュータ棟システム研究開発室1にあり、利用可能時間は土日祝日を除く9時から17時までとなっています。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_medeia.html

Official web site:

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

アプリケーションのバージョンアップについて

1. VASP

擬ポテンシャルファイル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である VASP をバージョン 5.3.3 にバージョンアップしました。

VASP 5.3.3 では主に次のような機能の追加および改良がなされました。

- ・ Tkatchenko-Scheffler vdW スキームの追加
- ・ ミクロカノニカルアンサンブル、カノニカルアンサンブルなど様々な MD アンサンブルの追加
- ・ non-collinear 磁気モーメントの対称性などのバグフィックス

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/usage_vasp5.2.html

Official web site:

<http://www.vasp.at/>

2. 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 を 14.5 にバージョンアップしました。また、ANSYS academic meshing tools も使用可能となりました。

ANSYS Multiphysics 14.5 では主に次のような機能の追加および改良がなされました。

- ・ ANSYS Workbench で破壊解析が可能
- ・ 複数の GPU アクセラレータに対応可能
- ・ 結果ファイルのフォーマット改訂によるデータのコンパクト化

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_ansys.html

Official web site:

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

3. CRYSTAL

結晶性固体の第一原理電子汎用シミュレーションプログラムである CRYSTAL をアプリケーションサーバーにインストールしました。CRYSTAL は分子、ポリマー、表面、結晶性固体において、以下のような物理的および化学的特性を計算可能です。

- ・ 構造特性
- ・ 振動特性
- ・ 電子構造
- ・ 磁気特性
- ・ 誘電特性
- ・ 弾性特性

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_crystal.html

Official web site:

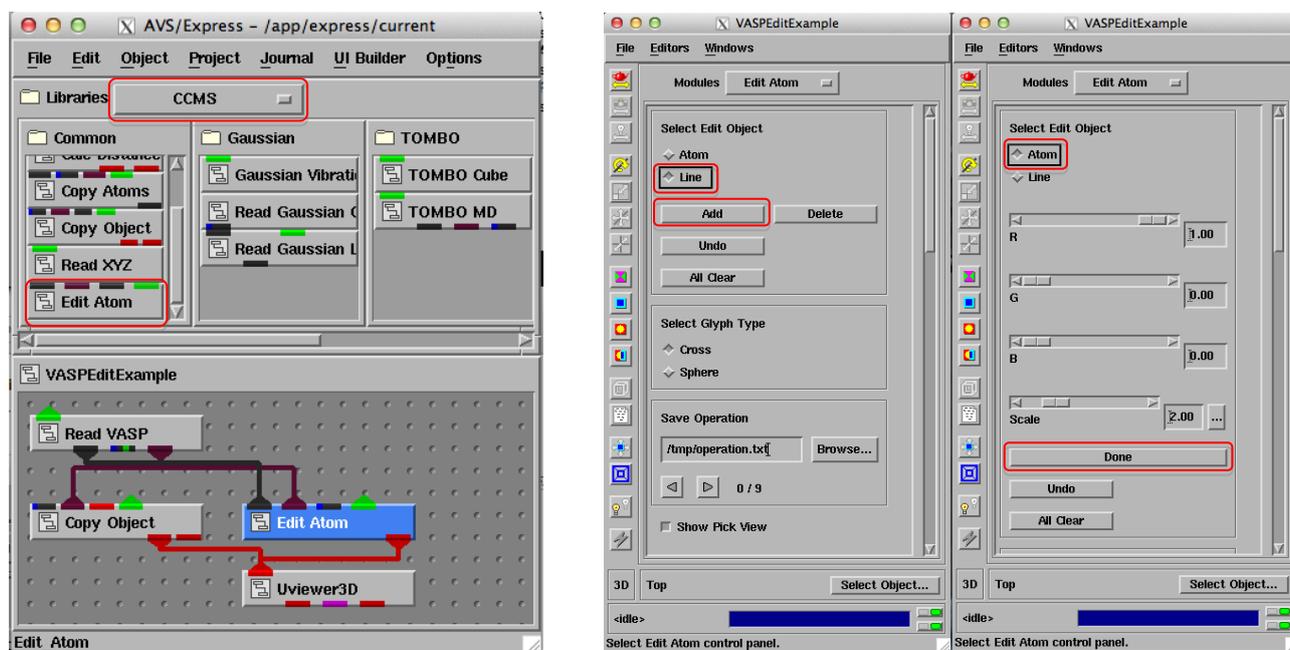
<http://www.crystal.unito.it/>

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です。本センターでは、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、各入力モジュールから出力される原子の属性情報である原子の色と原子半径、原子同士の結合情報を個別に編集する Edit Atom モジュール機能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本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 XP/Vista/7、Mac OS 10.6/10.7、Red Hat Enterprise Linux 6.x です。

Edit Atom モジュールについて

Edit Atom モジュールを使用することにより、特定の原子を強調して表示することができます。Edit Atom モジュールは、AVS/Express の CCMS ライブラリにあります。図 4 に Edit Atom モジュールの接続例と原子同士の結合情報(Line)および原子の色と原子半径(Atom)を操作する場合のコントロールパネルを示します。

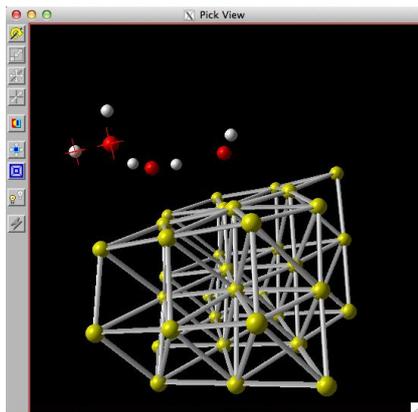


(1) Edit Atom モジュールの接続例

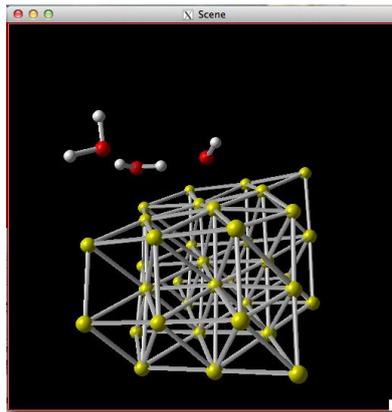
(2) コントロールパネル(Line 操作と Atom 操作)

図4. Edit Atomモジュールの接続例とコントロールパネル

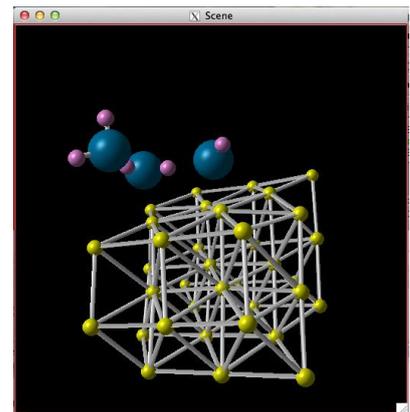
図 5 は白金電極上の酸素還元反応シミュレーション結果の可視化における Edit Atom モジュールの利用例です。標準の可視化状態では図 5-(1)のように黄色が白金、赤が酸素、白が水素で表されています。Edit Atom モジュールを利用して水分子の結合情報および原子の色と半径を操作し、強調表示した可視化例を図 5-(2)、図 5-(3)に示します。図 5-(1)の選択画面(Pick View)で操作する原子と原子を選択後、図 4-(2)コントロールパネルで Line を選択して[Add]ボタンを押下することで図 5-(2)のように結合線が追加され、Atom を選択して操作するパラメータを入力し、[Done]ボタンを押下することで図 5-(3)のように原子の色と原子半径が変更され、効果的な表示を得ることができます。



(1) 選択画面(Pick View)



(2) 結合線の追加



(3) 原子の色と原子半径の変更

図 5. Edit Atom モジュールの利用例

AVS/Express 講習会を実施

2012 年 12 月 11 日(火)に本所 2 号館 1 階会議室で AVS/Express の講習会を行い、所内外から 14 名(所内 9 名、所外 5 名)の受講者がありました。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。当日は、サイバネットシステム株式会社より講師をお招きし、AVS/Express の概要、基本操作とモジュールについて、応用と実習、質疑応答という内容で約 4 時間にわたり英語にて行いました。また、2012 年度に本センターで開発した Edit Atom モジュールの機能についても紹介されました。



AVS/Express 講習会の様子

大判 B0 プリンターの利用について

本センターではスーパーコンピューティングシステムをご利用の方を対象に大判 B0 プリンターのサービスを提供しています。印刷用の PC(Windows、Mac)を用意しておりますので、データを PDF ファイルで USB あるいは CD/DVD にてご持参の上、ご利用ください。

機種: HP Designjet Z5200 PostScript

設置場所: スーパーコンピュータ棟システム研究開発室 1、2 号館 7 階計算材料学センターシステム研究開発室 2

利用可能時間: 土日祝日を除く 9 時から 17 時

料金: 無料

新人職員あいさつ

4月から計算材料学センターで技術職員としてお世話になっております丹野航太と申します。出身は仙台ですので地元で働けることを嬉しく思っています。

仙台高専で本科と専攻科あわせて7年間、電子工学と情報の勉強をしていました。高専時代は、部活動はしていませんでしたが、毎年大崎八幡宮のどんと祭の裸参りに参加していました。おかげで7年間、風邪をひくこともなく健康に過ごすことができました。仕事をする上で体が資本なので、これからも健康には気を付けたいと思います。

専攻科では並列計算の勉強をしていたので、スーパーコンピューティングシステムに関わる仕事に就くことができ大変嬉しく思っています。私は現在、計算材料学センターの職員として仕事ができるようになるためにLinuxの管理や並列計算の勉強をしています。学生の頃にも少しは触れてきたことですが、改めて勉強してみると理解が浅いところや知らなかったことなど新たな発見があり、勉強することの大変さと少しずつですが理解することの面白さを感じている毎日です。実際にその知識が活かせるように頑張りたいと思います。

社会人としての第一歩を計算材料学センターで迎えらることを嬉しく思っています。仕事に慣れないうちは、ご迷惑をおかけすることもあるかもしれませんが、一人前になれるよう頑張りますので、よろしくお願い致します。



技術一般職員 丹野 航太

平成25年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日

スーパーコンピューティングシステムは、基本的に奇数月の最終週の月曜日に定期保守を行っています。

今年度、スーパーコンピューティングシステムは以下の日程で定期保守を行う予定です。また、片平地区の計画停電により停止することもあります。保守時間はその時の保守内容によって異なりますので、詳細についてはそのつど、メールでお知らせいたします。皆様のご協力をどうぞよろしくお願いいたします。

定期保守予定日

2013年（平成25年）奇数月の最終週月曜日

5月27日、7月29日、9月30日、11月25日

2014年（平成26年）奇数月の最終週月曜日

1月27日、3月24日

片平地区の停電日程

2013年8月4日（日）7:30から18:00まで

定期保守日については、センターのホームページでも案内しています。

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/news/maintenanceyear.php>

平成 24 年度計算材料学センター見学者

期間:2012年4月～2013年3月

年月日	見学者名	所属 / 会議など
2012年4月26日	CMRI 運営委員会出席者 2名	計算材料科学研究拠点(CMRI)
2012年5月22日	Zi-Kui Liu 氏 他 3名	Pennsylvania State University
2012年5月28日	Y. B. Kishore Kumar 氏	Sree Vidyanikethan Engineering College
2012年6月19日	CMRI 研究会参加者 3名	計算材料科学研究拠点(CMRI)
2012年7月13日	何 崗氏 他 6名	中国地質大学
2012年7月18日	土谷 浩一氏	独立行政法人物質・材料研究機構
2012年7月23日	計算材料学センター 新システム披露式出席者 66名	計算材料学センター新システム披露式
2012年7月25日	夏期講習会参加者 18名	第 82 回東北大学金属材料研究所夏期講習会
2012年9月13日	Kyle Gresham 氏 他 7名	European Office of Aerospace Research and Development
2012年11月23日	ACCMS-VO7 参加者 21名	The Seventh General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization
2012年11月29日	Summit of Materials Science 2012 出席者 22名	材料科学国際サミット
2013年2月22日	猿倉 信彦氏 他 3名	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター
2013年3月15日	本郷 研太氏 他 2名	北陸先端科学技術大学院大学

他 見学者総数 173名



■ 計算材料学センター新システム披露式出席者 66名
2012年7月23日



■ 金属材料研究所夏期講習会参加者 18名
2012年7月25日

計算材料学センターだより No.19

2013年5月16日(木)発行

16th May (Thu), 2013

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.edu/~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