

計算機マテリアルデザイン(CMD®) ワークショップ



主催：阪大ナノセンター、阪大基礎工、阪大産研、阪大工、阪大理物理、神戸大、阪大QEDRI、阪大スピントロニクスセンター、明石高専、近大高専、東大スピントロニクスセンター、東北大スピントロニクスセンター、慶應大スピントロニクスセンター
共催：東大物性研、PCOMS、DPMSD、Fugaku BFC

詳細は <https://cmdworkshop.sakura.ne.jp/index.html>



CMD®ワークショップは第一原理計算手法の公開と普及を目指し、2002年9月に大阪大学の研究者を中心に第1回を開催しました。年2回の開催を続けて2021年2月22日-26日開催で第38回となります。この間、第17回(2011年9月)からスーパーコンピュータコースを設置し、「京」のプロジェクトに真っ先に対応しました。第29回からはスピントロニクス・デザインコースを新設し、スピントロニクス学術連携教育研究センターとも連携しています。第35回からはマテリアルズインフォマティクスコースを新設し、機械学習の方法を用いた物質設計の講義実習を行っています。第37回と38回はオンラインで開催です。

ビギナーズコース

アドバンストコース

スーパーコンピュータコース

スピントロニクスデザインコース

マテリアルズインフォマティクスコース

時間	第1日(2/22)	第2日(2/23)	第3日(2/24)	第4日(2/25)	第5日(2/26)
9:00	開会式	開会式	開会式	開会式	開会式
10:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
11:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
12:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
13:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
14:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
15:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
16:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
17:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
18:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
19:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
20:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
21:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座

時間	第1日(2/22)	第2日(2/23)	第3日(2/24)	第4日(2/25)	第5日(2/26)
9:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
10:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
11:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
12:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
13:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
14:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
15:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
16:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
17:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
18:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
19:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
20:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
21:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座

時間	第1日(2/22)	第2日(2/23)	第3日(2/24)	第4日(2/25)	第5日(2/26)
9:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
10:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
11:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
12:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
13:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
14:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
15:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
16:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
17:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
18:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
19:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
20:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
21:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座

時間	第1日(2/22)	第2日(2/23)	第3日(2/24)	第4日(2/25)	第5日(2/26)
9:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
10:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
11:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
12:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
13:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
14:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
15:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
16:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
17:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
18:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
19:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
20:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
21:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座

時間	第1日(2/22)	第2日(2/23)	第3日(2/24)	第4日(2/25)	第5日(2/26)
9:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
10:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
11:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
12:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
13:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
14:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
15:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
16:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
17:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
18:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
19:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
20:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座
21:00	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座	基礎講座

DFT計算の主な手法であるKKR法、擬ポテンシャル法、FLAPW法を一通り体験する。

ビギナーズコースの中のコードや特徴的な計算手法のコードの中から2つ選んでそれぞれのコードの得意なテーマの実習をする。

STATE-SenriあるいはRSPACEで、5日間スパコンを使って実習をする。

前半を現代的な磁性の基礎理論とスピントロニクスの応用研究の講義を受講し、後半はスピントロニクスに関連した実習を行う。

構造探索法や機械学習の手法を用いた物質設計の基礎の講義と実習を行う。



第36回



第37回

これまでの参加延べ人数**1728名**(学生1037名、大学関係者176名、高専9名、高校関係者1名、研究所など83名、民間企業423名)約**20-30%**がリピーターで、毎回**90%以上**が満足と回答。