

グラフィイトからダイヤモンドを仮想実験で作ってみよう

1. 手持ちのノートPCに分子動力学計算用ソフトをインストールして、高圧下でグラフィイト（黒鉛）がダイヤモンドに相転移するまでの動力学をシミュレーションします。
  2. 計算結果はムービーで表示しながら解析します。
  3. 解析を通して相転移の機構に関して理解を進め、その結果をプレゼンします。
- ノートPCはお貸しできます。計算にはlammmps、可視化にはVMDを用います。いずれもフリーウェアです。