

第128回フロンティア材料研究所講演会

「第一原理計算」チュートリアル

オンライン開催

東京工業大学 科学技術創成研究院
フロンティア材料研究所

教授 神谷 利夫
Professor Toshio Kamiya

今では第一原理計算は、物質の構造、機能の起源などを解析するための「実験ツール」としてだけでなく、未知の構造の新材料の設計・開発にも応用されるようになっていきます。

本チュートリアルでは、関連する簡単なpythonプログラム（クローニッチ・ペニーモデル、平面波法、転送行列法、半導体統計など）を参加者と共有し、必要に応じて実演をいたします。

第1回

11.2 月 9:00-10:30

「第一原理計算でなにができるか」

"What we can know from first-principles quantum calculations: Overview"

本講義の第一回は、特に学生、初学者、あるいは、これから計算機科学を研究・開発に利用していきたいと考えている方を対象に、「第一原理計算」によってどのような情報が得られるのか、どのように材料研究に使うことができるかについて、実例を含めて紹介いたします。

第2回

11.9 月 9:00-10:30

「量子力学、バンド理論の基礎と密度汎関数の問題」

"Fundamentals of quantum physics, band theory, and DFT"

第二回目では、第一原理計算の基礎となる量子理論、バンド理論、密度汎関数理論について、量子力学方程式の導出に関する一般的な手続きとさまざまな定式化の紹介、実空間描像によるバンド理論の理解、原子価結合法と分子軌道法の比較による交換相互作用と電子相関相互作用を通して、密度汎関数法を利用する際に注意すべき点を理解することを目的とします。

第3回

11.16 月 9:00-10:30

「第一原理計算に関する話題、Q&A（参加者からのリクエスト）」

"Other topics and Q&A about DFT: Topics will be chosen from requests of the previous participants."

第三回目では、第一回、第二回の講義を通じて参加者から質問、あるいは、トピックスの提案をいただき、それらに答える形で講義を進めます。

申込フォームより
お申し込みください。



参加費無料

- ※ Zoomウェビナーによる開催です。
- ※ 東工大の方は、東工大メールアドレスでご登録ください。

お申込みに関する問合せ先：
共同利用・研究支援室
(kenkyushien@msl.titech.ac.jp)

詳細は、WEBをご覧ください。
<http://www.msl.titech.ac.jp/seminar/2857.html>



講演内容に関する問合せ先：
神谷 利夫
(tkamiya@msl.titech.ac.jp)

主 催 | 東京工業大学
科学技術創成研究院
フロンティア材料研究所

共 催 | 物質・情報卓越教育院