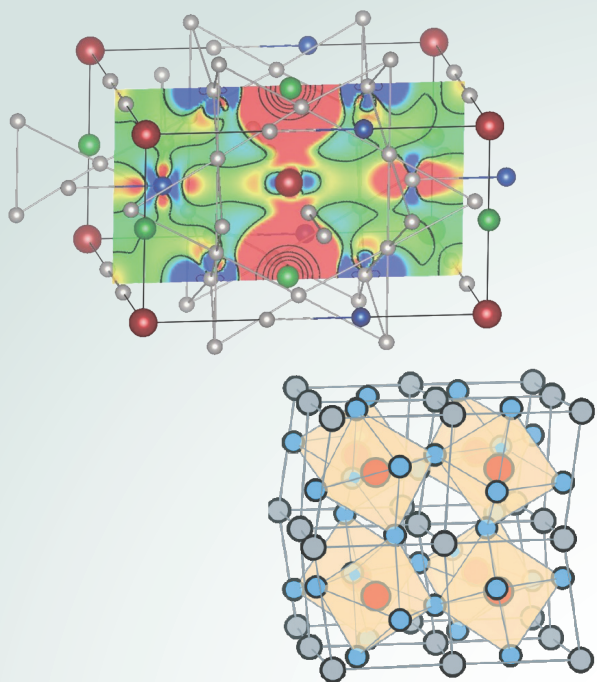


その材料、計算しましたか？



今日からはじめる

計算材料科学

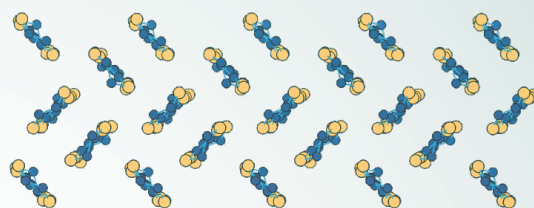
理論家も実験家も、大学院生も研究者も、アカデミアも企業の方も、

早稲田大学 各務記念材料技術研究所

計算材料科学
連続セミナー



電子材料第1シリーズ 2021年7月～10月



$$\langle \begin{matrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{matrix} + \begin{matrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{matrix} + \begin{matrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{matrix} + \dots \rangle$$

$$\Rightarrow \alpha \begin{matrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{matrix} + \beta \begin{matrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{matrix} = \begin{matrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{matrix}$$

物質科学としての
密度汎関数法

第2回

第1回

密度汎関数理論に基づく
第一原理電子状態計算

尾崎 泰助 先生

(東京大学物性研究所)



7/13(火) 15:30-17:00

7/14(水) 14:00-17:15

第3回

相関機能材料の電子論

三宅 隆 先生

(産業技術総合研究所)



9/28(火) 14:00-17:15

9/29(水) 15:30-17:00

電子材料にひそむ
多体電子系の計算科学

第4回

山地 洋平 先生

(物質・材料研究機構)



10/18(月) 13:00-18:00

開催方法 オンライン開催 (Zoom ミーティング)

対象 一般 (学部レベルの量子力学を理解していることを想定した内容です)

参加費 無料

申込方法 右記のURLよりお申し込みください。 <https://www.waseda.jp/fsci/zaiken/news/5363>

受付期間は各回の日程の1週間前の17:00までです。ただし、定員を超えた場合はその時点で受付終了とさせていただきます。



お問合せ

事務的なこと：早稲田大学各務記念材料技術研究所 zaikenjointjimu@list.waseda.jp

セミナーの内容に関すること：早稲田大学 中 惇 naka@aoni.waseda.jp

密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算

尾崎 泰助 先生（東京大学物性研究所）

7/13(火) 15:30-17:00

7/14(水) 14:00-17:15

密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算の基礎と応用に関して講義を行う。現実物質の物理・化学的性質の包括的な理解の枠組みを与える密度汎関数理論の基本概念、定式化及びその実装を解説する。また密度汎関数理論の応用として、反応座標解析、電気伝導特性、内殻励起現象等に関して応用事例と共に議論する。第一原理計算プログラム OpenMXのチュートリアルも実施する予定である。

【経歴】

2000	北陸先端科学技術大学院大学 材料科学研究科 博士後期課程修了 博士(材料科学)
2000-2001	アトムテクノロジー研究体 博士研究員
2001-2007	産業技術総合研究所 計算科学研究部門 常勤研究員
2007-2014	北陸先端科学技術大学院大学 准教授
2014-2017	東京大学 物性研究所 特任教授
2017-現在	東京大学 物性研究所 教授

物質科学としての密度汎関数法

押山 淳 先生（名古屋大学 未来材料・システム研究所）

9/15(水) 14:00-17:15

9/16(木) 15:30-17:00

密度汎関数理論は、実際の物質の静的および動的性質を、経験的パラメータを用いずに定量的に記述することに成功してきた。本講義では、密度汎関数法の多体問題の解法としての側面、分子動力学計算に代表される、ダイナミクスあるいは位相空間サンプリング法としての側面、さらには実際の物質の物性予測ツールとしての側面、を議論する。具体的には、深層学習による汎関数開発のアプローチ、Car-Parrinello分子動力学法による化学反応経路と自由エネルギー障壁決定などのトピックスを紹介する。物質科学への応用として、半導体のエピタキシャル成長、デバイス界面構造、点欠陥・線欠陥の電気的性質などを議論する。

【経歴】

1981	理学博士（東京大学）
1981-1983	東京大学助手（理学部物理学科）
1983-1985	IBM T. J. Watson Research Center 研究員
1985-1995	NEC研究所研究員
1995-2007	筑波大学教授（物理学系、後に改組で数理物質科学研究所）
2007-2018	東京大学教授（工学研究科物理工学専攻）
2018-現在	名古屋大学特任教授（未来材料・システム研究所）

関連機能材料の電子論

三宅 隆 先生（産業技術総合研究所）

9/28(火) 14:00-17:15

9/29(水) 15:30-17:00

第一原理計算とは、実験で得られるパラメータに頼ることなく、電子論に基づき物性を定量的に記述する計算科学的手法である。本セミナーでは、標準的な第一原理計算手法である密度汎関数理論の基礎理論を学ぶとともに、磁性材料などを例にとり、現実の物質の性質を第一原理計算に基づき理解することを目標とする。電子関連の強い系を解析するための低エネルギー有効モデルの導出や、不規則合金など周期性の破れた系の取り扱いも議論する。

【経歴】

1998	東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了 (博士(理学))
1998-1999	科学技術振興事業団研究員
1999-2000	JRCATフェロー
2000-2006	東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻 助手
2006-	産業技術総合研究所計算科学研究部門 研究員
現在、	産業技術総合研究所機能材料コンピュータシミュレーション 研究センター 研究チーム長

電子材料にひそむ多体電子系の計算科学

山地 洋平 先生（物質・材料研究機構）

10/18(月) 13:00-18:00

多岐にわたる物質の機能と個性の背後にひそむ多数の電子の振る舞いを、計算科学がどのように扱い、明らかにしてきたかについて紹介します。一電子の波動関数から出発して、多電子の波動関数が必要になる例として、ヘリウム原子、水素分子や磁性イオンの電子状態について、PCで実行可能な数値計算実習を交えながら学んでいきます。さらに時間が許せば、密度汎関数理論の実装に用いられている電子ガスの多体波動関数についても触れる予定です。講義の前提として、プログラミングに触れた経験と量子力学、より具体的には、水素原子のシュレディンガー方程式の解や、角運動量の合成について学んでいることを想定しています。

【経歴】

2010年2月	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 博士課程修了
2010年10月	ニュージャージー州立大学 博士研究員
2011年10月	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 特任助教
2013年6月	東京大学大学院工学系研究科附属 量子相エレクトロニクス研究センター 特任講師
2016年12月	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 特任准教授
2021年4月現在	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 主任研究員