

平成29年度 大学院特別講座

講座名：材料物性シミュレーションの基礎と実践
担当教員：伊藤篤史、高山有道（講習：計10～12コマ程度）
開催日時：平成29年6月～（参加希望学生と調整、4～5日間の集中講義形式を想定）
<p>内容：</p> <p>材料物質の物性を調べるには物質内電子の量子力学的な電子状態を知ることが重要である。本講義では物質の電子状態を求める密度汎関数理論の基礎を学び、そこから得られる各種の物性値について知見を得る。また、実習として実際のシミュレーションコードを用いて各自で電子状態の計算を実施する。各人がPCからワークステーションに接続し、コードのインストールから計算の実行、計算結果の解析方法の習得を目指す。</p> <p>（基礎講義）</p> <p>シュレディンガー方程式から密度汎関数理論までの基本的な流れを学ぶ。また材料の各種物性値について、密度汎関数理論からどのように求めるのかを系統的に解説する。</p> <p>（実習）</p> <p>フリーソースのシミュレーションコード OpenMX を用いて、各人で材料物性の計算を実際に行う。PCからワークステーションへの接続方法など初心者向けの講習から開始し、ソフトのインストール方法、操作方法を学び、実際にサンプル物質の電子状態計算を行う。計算結果の解析方法も学ぶ。</p>
<p>本講座の売り：</p> <p>昨今では核融合炉材料の研究においても密度汎関数理論を用いた研究が増えてきている。本講習を受けることで、自身でシミュレーションを行って物性値を求められるようになります。PCの操作では担当教員がマンツーマンで指導します。過去に同内容の講習を受けた学生(他大学)は、全員が初心者でしたが後に計算できるようになり、投稿論文や学位論文に至った例も複数あります。</p>
<p>担当教員の研究内容：</p> <p>伊藤篤史（基礎物理）：プラズマ物質相互作用のシミュレーション研究に従事 高山有道（基礎物理）：プラズマ物質相互作用のシミュレーション研究に従事</p>
募集定員：5名程度（希望が多い場合は考慮します）
<p>申込み先：大学院連携係（daigakuin@nifs.ac.jp）</p> <p>内容に関する問い合わせ先：伊藤篤史（ito.atsushi@nifs.ac.jp） 内線番号：2381</p>
<p>備考：</p> <p>一週間の集中講義形式が望ましいです。受講者の希望によっては二週に分けることも検討します。所外の大学院生も同時に受講する可能性があります。総研大担当となる前から所外向けに催しており今年で五回目になります。</p>