

授業科目名 ( 英文名 )	先端材料計算科学特論 (Advanced Computational Materials Science)	科目区分 対象学生	
単位数	2.00	開講年次・ 学期	1, 2, 3年次・前期
担当教員	伊藤 聡	所属	非常勤講師
オフィス・場所		連絡先	
講義目的及び到達目標	<p>講義目的 新機能デバイス・新材料の探索・設計開発のために必要な計算科学的手法および情報工学的手法を学び、身に着けることを目的とする。</p> <p>到達目標 計算機を用いて固体（特に化合物半導体）の電子構造を数値的に求め、その意味（物性との関係）を説明できる。</p>		
講義内容・授業計画	<p>1．量子力学の復習 シュレーディンガー方程式、エネルギー固有値、固有関数、スピンなど</p> <p>2．固体構造論 結晶構造、逆格子、k空間、群論の初歩など</p> <p>3．固体電子論 ハートリーフォック法、密度汎関数法、エネルギーバンド理論、格子振動、光吸収スペクトル、磁性など</p> <p>4．固体電子論における数値計算法 固有値・固有ベクトルを求める数値計算法、カー・パリネロ法など</p> <p>5．電子構造計算ソフトウェア 第一原理分子動力学ソフトウェアPHASEを使った半導体バンド計算、強結合近似分子動力学ソフトウェアELSESを使った動的構造計算など</p> <p>6．材料データベース概論 MatNavi、OQMDなど</p> <p>7．マテリアルズインフォマティクス概論 物性推定法、ニューラルネットなど</p> <p>講義後半（4．以降）では計算機（PC）を使っての実習の併用が望ましい。機会があれば大型計算機（スーパーコンピュータ）を使った固体の電子構造計算を行う。</p>		
テキスト	とくになし		
参考文献	とくになし		
成績評価の基準・方法	レポート課題により評価する（3課題から1問選択）		
履修上の注意・履修要件	初歩的なプログラミング言語、OSに関する知識（コンパイラの使い方、エディタの使い方等）があるほうが望ましい（必須ではない）。		
実践的教育	該当しない		
備考			