山梨大学
UNIVERSITY OF YAMANASHI
クリスタル科学研究センター

第７回クリスタル科学セミナー

主催：クリスタル科学研究センター
共催：圧電フロンティア研究ユニット
光化学機能材料研究ユニット

第７回クリスタル科学セミナーを以下の要領で開催致します。今回は無機化合物の第一原理計算の応用について東京工業大学の特任准教授の Hena Das 先生にご講演頂きます。奮ってご参加下さい。

日時：平成３１年２月 19 日(火)14 時００分～15 時３０分
場所：山梨大学クリスタル科学研究センター４階セミナー室
Dr. Hena Das
Specially Appointed Associate Professor (PI) Laboratory for Materials and Structures Institute of Innovative Research, WRHI Tokyo Institute of Technology

Title：Density Functional Theory – A powerful approach for materials simulations

Density Functional Theory (DFT) is, at present, the most successful method for the quantum mechanical simulation of materials at various dimensions. DFT based approaches have been used not only to understand, but also to predict properties of crystalline matter and new materials with superior physical properties. In this seminar, we plan to outline the historical development of DFT and the basic concepts underlying this theory. The various forms of exchange-correlation functional and their comparative review will be presented here. We shall discuss the plane-wave pseudopotential technique, which is one of the most successful techniques to employ DFT for practical calculations. Next, we shall elaborate upon various applications of DFT in materials simulation. The presentation will be concluded with a discussion on various limitations of DFT and post-DFT methods.

問合せ先：クリスタル科学研究センター
熊田　(055-220-8615　kumada@yamanashi.ac.jp)