

第一原理計算講習会概要

1. 第一原理計算の概要

- (1) 「第一原理計算」は何を計算しているか
- (2) 何ができるか
- (3) できないことは何か
- (4) 代表的な第一原理計算コードの紹介
(それぞれの特徴・適性など)
⇒ WIEN2k, VASP, Open-MX, Quantum Espresso

2. 基本的な計算の実例 (WIEN2k, VASP, あるいはQE)

- (1) バルク材料の電子状態計算, バンド図, 状態密度, 電荷密度分布
- (2) 物性解析: XAS, EELS等
- (3) 表面・不純物を含む系の計算方法
- (4) 研究に使う際の注意点, コツ等のまとめ
(間違った使い方をしている論文は少なくない)

3. 少し進んだ計算事例

- (1) スピン軌道相互作用の導入
- (2) 強相関電子系の計算方法 (LDA+U法)
- (3) その他, いくつかのリクエストに応えたいと思います.

以上