DxMT ｜ 東京科学大学拠点 D²MatE
2026年度チュートリアルシリーズ
フロンティア材料研究所学術講演会

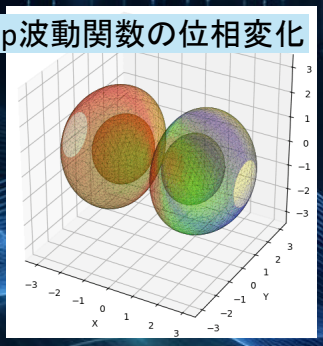
初心者にもわかる第一原理バンド計算

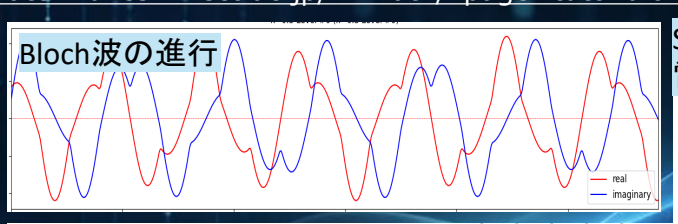
–生成AIとToyプログラムで理解するバンド理論・データ解析 Part 2–

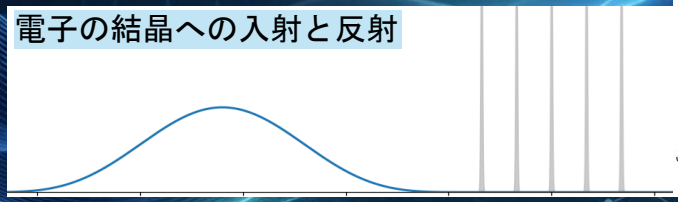
主催　D²MatE
共催　元素戦略MDX研究センター、フロンティア材料研究所、六研出島コンソーシアム
協賛　物質・情報卓越コース、物質理工学院、VI Materials Positive Society
お問い合わせ　kamiya.t.aa@m.titech.ac.jp

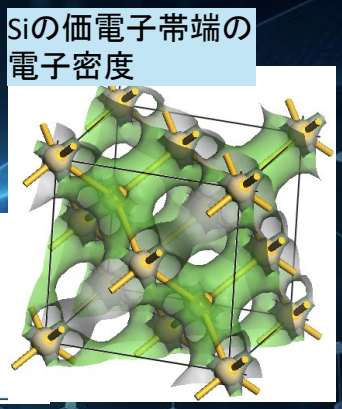
開催方法: Zoom (参加登録者にご連絡します)
参加費　: 無料

講師: 神谷 利夫 (総合研究院 元素戦略MDX研究センター／フロンティア材料研究所)
Web　: http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/?page=tutorial&id=2026tutorialcourse









チュートリアル内容:

第一原理計算で何がわかるのか、どのような仕組みで計算結果が得られるのか？
量子力学、バンド理論から第一原理計算まで、材料科学研究での利用例を紹介しながら解説します。簡単なToyプログラムによる計算結果を視覚的に確認することで、複雑な計算手法の基本的な仕組みを直感的に理解することを目標とします。
使用するプログラムは上記Webおよび
http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/sphinx/tutorial2026/
で公開します。

第３回　11/27 13:00-15:00
第４回　12/11 15:00-17:00

第3回・第4回参加申し込み:
https://zoom.us/webinar/register/WN_7-Pxa6xTQdi45fD4Im1kWg#/registration

次の内容を２日に分けて、順に解説します。

導入部 (11/27予定)　　: 第一原理計算で何がわかるか: 概論
第１部 (11/27予定)　　: 量子力学のモデル計算から波動関数の動きを視る
第２部 (11/27予定)　　: 結晶のバンド構造はなぜ生まれるか
第３部 (11/27,12/11予定): 第一原理計算で何がわかるか: 仕組みと一緒に理解する