

第2回 物質科学談話会

および CIRFE セミナー

日時：平成29年10月24日（火）

14:00-15:30

場所：ベンチャービジネスラボラトリ3階ホール

講師：宮崎剛（NIMS）

題目：大規模第一原理計算プログラム
CONQUEST の開発と応用

内容：

密度汎関数理論（Density Functional Theory: DFT）にもとづく第一原理計算は、物質・材料科学分野において大きな貢献をしてきた。しかし、通常の手法では計算量が系の含む原子数 N の3乗で急激に増大するために、数千原子以上を含む大規模系に対する第一原理計算は困難であった。我々は巨大系に対する第一原理計算を実現するために、局在軌道、オーダー N 法を用いた大規模第一原理計算プログラム CONQUEST を開発してきた。オーダー N 法の最近の発展は著しく、CONQUEST では百万原子を含む巨大系も第一原理計算で扱うことができる。セミナーでは、手法、プログラムの概要と半導体ナノ構造物質に対する応用例を紹介する。

問合せ先：白石賢二

shiraishi@cse.nagoya-u.ac.jp