



# 新学術領域研究「原子層科学」理論班

## 第一原理電子構造計算講習会



原子層科学  
Science of Atomic Layers

**日時：**平成26年2月27日（木）13:00 ～ 2月28日（金）12:30

**場所：**東京工業大学 大岡山キャンパス 本館2階 H284室  
東京都目黒区大岡山2-12-1（東急目黒線・大井町線 大岡山駅）  
<http://www.titech.ac.jp/maps/ookayama/index.html>  
<http://www.titech.ac.jp/maps/ookayama/campus/index.html>

**対象：**新学術領域「原子層科学」あるいは東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻・基礎物理学専攻に所属する研究室の教職員・研究員・大学院生とその関係者

**内容：**主に、quantum-ESPRESSO (<http://www.quantum-espresso.org>) と呼ばれる第一原理計算コードの使い方を解説します。特に、グラフェンやその他の2次元物質に対して、エネルギー論（構造最適化、凝縮エネルギーなど）および電子状態（バンド構造、状態密度、波動関数など）の計算方法を紹介し、実際にプログラムを実行してもらいます。また、密度汎関数法に関する簡単な講義も行う予定です。

### 準備事項：

実際に自分でプログラムを動かしてみただけのため、端末としてノートパソコンを持参していただきます。OSは問いませんが、ネットワークに接続可能で別の計算機にsshでログインできる環境を事前に用意して頂きます。事前準備については追って詳細を連絡致します。

**登録：**添付のエクセルファイルに記載して、[qe-lecture@stat.phys.titech.ac.jp](mailto:qe-lecture@stat.phys.titech.ac.jp) へ送付してください。

**申し込み締切：**平成25年12月20日（金）

### 主催者：

新学術領域研究「原子層科学」  
東京工業大学ナノサイエンス・量子物理学国際研究センター  
東京工業大学大学院理工学研究科 物性物理学専攻・基礎物理学専攻

### 問い合わせ先：

斎藤 晋 [saito@stat.phys.titech.ac.jp](mailto:saito@stat.phys.titech.ac.jp)  
是常 隆 [koretune@stat.phys.titech.ac.jp](mailto:koretune@stat.phys.titech.ac.jp)