

FRIS/TI-FRIS

Vol.43

Vol.27

Hub Meeting

発表者：

Nguyen Tuan Hung *Assist. Prof.*

(東北大学 学際科学フロンティア研究所 / 物質材料・エネルギー)

Density-functional theory: A powerful tool for interdisciplinary materials science

*Language: English

Summary

Density-functional theory (DFT) is a computational method used in materials science, chemistry, and condensed matter physics to study the electronic structure of materials. It is based on quantum mechanics and can predict accurate results, which can compare directly with experimental data. Thus, DFT has become an important tool for predicting the properties of materials, such as their electronic structure, chemical reactivity, crystal lattices, and spectroscopic properties. This talk will introduce how to use the DFT in interdisciplinary materials science. We also show the hands-on tutorial for Quantum ESPRESSO, a wide-used open software for DFT calculation, on personal computers.

第43回 FRISハブミーティング/第27回 TI-FRISハブミーティング

2023.

5.25

11:00 - 12:00



参加登録

ハイブリッド開催 (学際科学フロンティア研究所セミナー室 & Online)



TI-FRISは、弘前大学、岩手大学、東北大学、秋田大学、山形大学、福島大学、宮城教育大学によるコンソーシアム事業です。本イベントにはこれら参画機関の方と「世界で活躍できる研究者戦略育成事業」の育成対象者がご参加いただけます。

FRIS Hub Meeting Website <https://www.fris.tohoku.ac.jp/feature/fris-hubmeeting/>

【お問い合わせ】 TI-FRIS 事務局 ti-fris@fris.tohoku.ac.jp