

# 初めての計算物性物理

FIT オープンキャンパス 2013-09-15 10:40~11:20

講義や卒業研究で学べる事を2つだけ紹介しました。

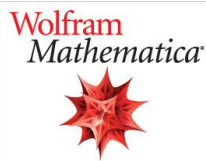
## 1. 計算機（パソコン）が与える数学力（入試問題を解こう）

問題 1-1：関数  $f(x) = (2x - 5)e^{-2x}$  の導関数  $f'(x)$  を求めよ

答え： $-4e^{-2x}(-3 + x)$

問題 1-2：関数  $f(x) = (2x - 5)e^{-2x}$  の定積分  $\int_0^{1/2} f[x] dx$  を求めよ

答え： $-2 + \frac{3}{2e}$

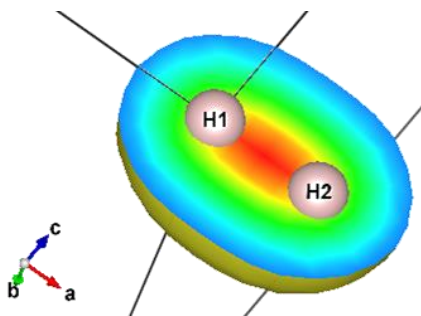


解説：このような高機能ソフトウェア（アプリ）が簡単に使える環境を、本学は学生に提供しています。しかし、物性物理で使う量子力学の方程式については、いかに高機能ソフトウェアでも答えを関数として導く事は出来ません。

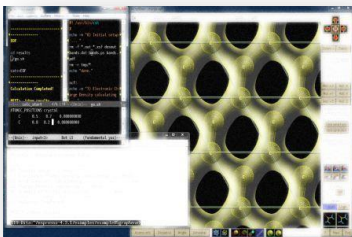
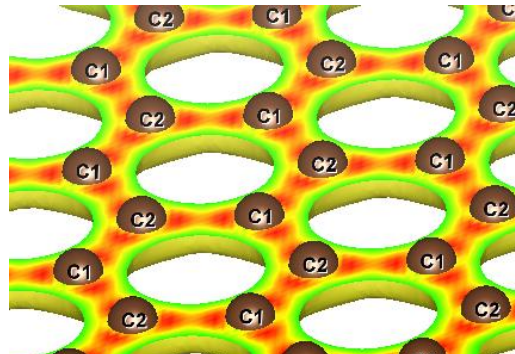
## 2. 計算機（パソコン）が与える科学技術計算力（新物質をデザインしよう）

問題 2：フリーソフト ABINIT を用いて、自分がデザインした物質の電子状態を求めよ。

水素分子の電子密度の空間分布：



グラフェンの電子密度の空間分布：



解説：関数として答えが出ない場合には、数値計算により答えを求めます。物性物理のような専門的な科学技術計算でも、多くの数値計算用ソフトウェアが知られています。近年ではABINITのように誰でも無料（フリー）で手に入るものも見られます。しかし、誰でも使いこなせるわけではありません。本学で学べるような科学の専門知識と情報処理システムの経験の両方が必要だからです。

<http://www.fit.ac.jp/~i-maruyama/>