

物理系大師演講 邀尾崎泰助講第一原理計算研究

學習新視界

【記者黃子涵淡水校園報導】為提升本校相關研究人員在第一原理材料模擬領域的卓越性以及加強國際合作，物理學系於12月24日下午2時，在科學館S215教室舉辦「大師演講」活動，邀請日本東京大學尾崎泰助教授以「Development of Low-order Scaling DFT Methods」為題，蒞校進行演講。

尾崎教授長年從事材料科學與大尺度系統計算之研究並積極開發第一原理計算之程式，他所開發的OpenMX軟體，也常被使用於相關領域之研究。第一原理計算是國際上從事材料模擬相關研究中不可或缺的工具，其所花費的計算時間很難減少至與系統大小成線性的關係，尤其是當研究的系統大小超過一萬顆原子時，計算之適用性可能會遭到質疑。

此次演講，尾崎教授將會說明他近幾年所發展出的數值精確解之低尺度(接近線性)計算方法與近似解之線性尺度計算方法，與此方法有關的細節，如採用的演算方法與基底函數等都會於演講時被討論。此外，尾崎教授還會對有關有效率之平行計算與快速傅立葉轉換等相關的主題來進行說明，也會針對參與OpenMX軟體開發的合作者與未來發展的可能性作介紹。

2019/12/23