

강의계획서

(2023학년도 2학기)

1. 교과목 정보(Course Information)

과목명(국문)	제일원리 기반의 소재 모델링 전산모사 방법론
과목명(영문)	First principles based computational methods for materials modelling

2. 교과목 개요(Course Description)

수업 개요	나노 소재의 정밀한 분석을 위한 양자역학 기반의 제일원리 계산법을 이해한다. 소재 모델링 전산모사 방법론에 대한 이론적 배경과 물성 해석 방법을 학습하여 수강생 본인의 연구에 적용할 수 있도록 한다.
교과 목표	제일원리 기반의 전산모사 방법론을 학습하고, 실제 연구 사례들을 소개함으로써 학생의 연구에 적용할 수 있도록 한다.

3. 주차별 강의계획(Course Schedule)

1주차	제일원리계산 서
2주차	전자밀도범함수이론
3주차	전자구조계산
4주차	VASP 소개
5주차	VASP 사용법
6주차	VASP 코드 실행법
7주차	VASP output 시각화
8주차	제일원리계산 응용사례1
9주차	Type-II superlattice
10주차	Double perovskite

11주차	Double perovskite-II
12주차	Ionic additives in perovskite