DxMT 東京科学大学拠点 D²MatE 2026年度チュートリアルシリーズ
東京科学大学 総合研究院 フロンティア材料研究所学術講演会

生成AIとToyプログラムで理解するバンド理論・データ解析

チュートリアルコース説明

神谷利夫

東京科学大学
総合研究院
元素戦略MDX研究センター

Institute of SCIENCE TOKYO

本チュートリアルには、
Microsoft365 Copilot / Chat GPT / Gemini / Claude等
を使用した結果が含まれています

チュートリアルコース2026 Web

http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/0tutorial/00seminar/2026tutorial_course.html

第1，2回の最新版資料を公開しています

<= 生成AIでつくった make_qr.py で作成

各回チュートリアル終了後に
・最終版資料
・動画
・次回、次々回の予定
を公開します





DxMT | 東京科学大学拠点 D²MatE　2026年度チュートリアルシリーズ
フロンティア材料研究所 学術講演会

生成AIとToyプログラムで理解するバンド理論・データ解析

主催　DxMT事業 東京科学大拠点 D²MatE
共催　元素戦略MDX研究センター、フロンティア材料研究所、六研出島コンソーシアム
協賛　物質・情報卓越コース、物質理工学院、VI Materials Positive Society

Update News

- New! 2026/10/30 11:39 第１，２回チュートリアル資料を公開しました: 20261030course_materials-V1.zip
- New! 2026/10/26 第２回チュートリアルの開始時刻を 11/10 13:00に変更しました
- New! 2026/10/21 第１回、第２回チュートリアルの参加申し込み受付を開始しました
  申し込み方法は、下記 「開催日時」をご覧ください

コース概要

本チュートリアルでは、バンド計算とデータ解析の基礎を、簡単なToyプログラムを動かしながら理解し、材料研究に利用できるようになることを目標とします。

これらの原理をプログラムを通して理解するため、最初に、生成AIの支援を利用して解析・シミュレーションプログラムやToyプログラムを作成する方法を学びます。あわせて、計算結果を研究に利用するうえで必要となる、プログラムの動作と信頼性を検証する手順を解説します。

チュートリアルの構成（予定）

- 01　生成AIプログラミング – 信頼できるプログラムを作る技術

本チュートリアルコースの目的と予定

バンド計算とデータ解析の基礎を材料研究に利用できるようになる

第１回第１部　生成AI一般の使い方を学ぶ
第１回第２部　生成AIコーディング：
Toyプログラムや、実用的な解析・シミュレーションプログラムを作る方法を学ぶ

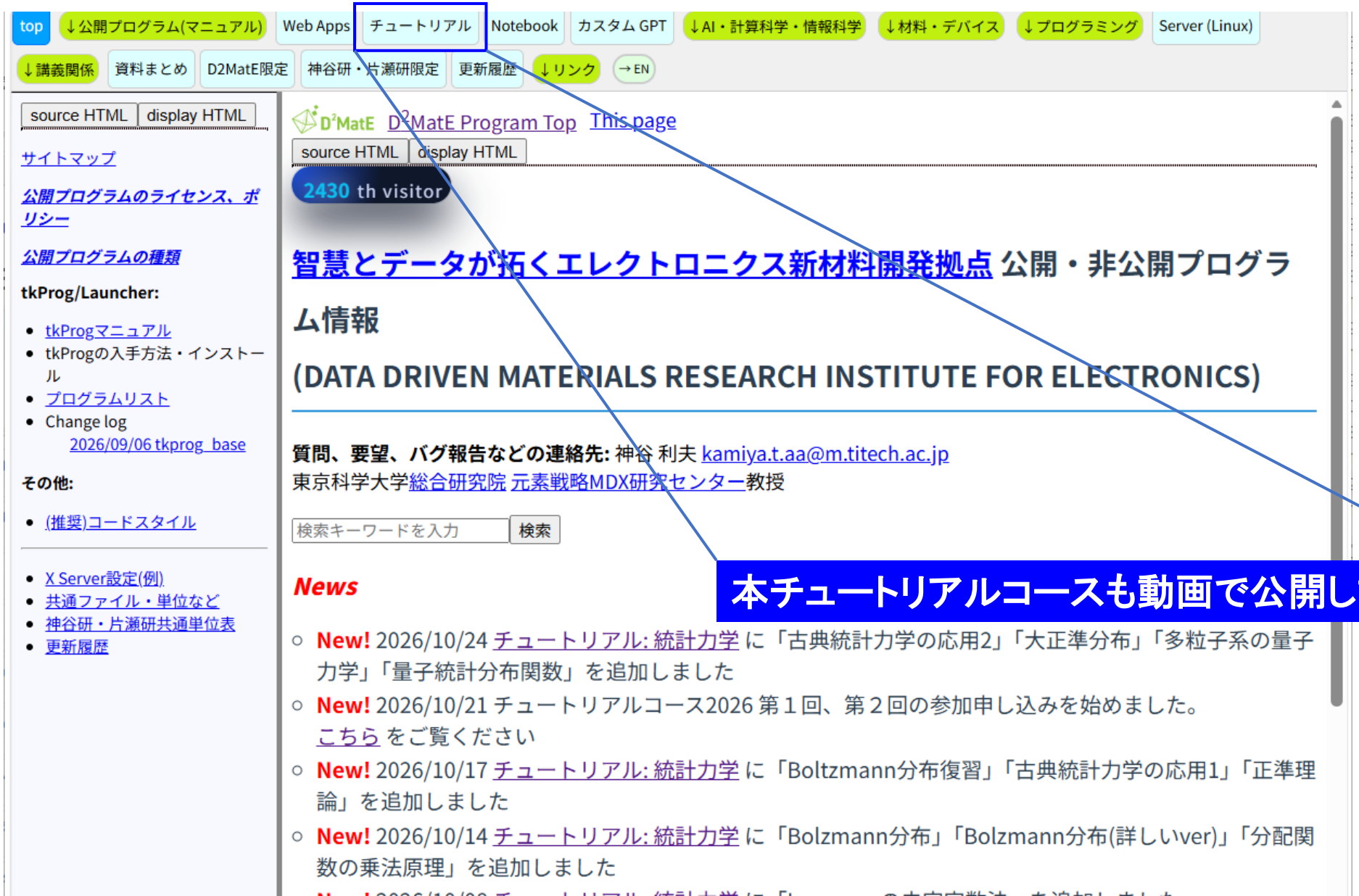
Toyプログラム: 計算手順を追える程度の簡単なプログラムを動かし、

第２回第１部　生成AIで作成したプログラムの動作検証・保証をする方法
第２回第２部　pythonプログラムのチューニング (高速化)

Toyプログラムを動かしながら、計算原理を学ぶ
第３、４回　バンド理論の基礎
第５，６回　データ解析の基礎

D²MatE 情報公開Web

http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE



講義ビデオ・チュートリアルなど

http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/D2MatE_programs.html?page=tutorial

top | Web Apps | tkProg/Launcher | チュートリアル | ↓AI・計算科学・情報科学 | ↓材料・デバイス | ↓プログラミング | Server (Linux) | ↓講義関係 | 資料まとめ | D2MatE限定
神谷・片瀬研限定 | 更新履歴 | ↓リンク | →EN

材料計算科学・データ解析チュートリアルコース

文部科学省 「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」 半導体拠点 D^{2}MatE では、 材料計算科学・データ解析に関するチュートリアルコースを開催いたします。

- ▶ 第3回 「生成AIの利用と注意 (前半)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 7:34
- ▶ 第3回 「生成AIの利用と注意 (後半)」
- ▶ 第3回 「生成AIの利用と注意 (著作権)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 8:44
- ▶ 第4回 「生成AIの利用例: 一般的な質問と画像生成 (Part 1: 一般的な Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 6:39
- ▶ 第4回 「生成AIの利用例: 一般的な質問と画像生成 (Part 2: データの
- ▶ 第4回 「生成AIの利用例: 一般的な質問と画像生成 (Part 3: 数学の公
- ▶ 第4回 「生成AIの利用例: 一般的な質問と画像生成 (Part 4: 画像生成
- ▶ 第5回 「生成AIの利用例: 翻訳 (翻訳の注意、比較、クロスチェック)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 7:01
- ▶ 第5回 「生成AIの利用例: 翻訳 (translate.py)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 6:54
- ▶ 第6回 「生成AIの利用例: 学生と教員のためのpythonとChatGPT活用 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 9:15
- ▶ 第8回 「薄膜トランジスタの原理と評価 (AOS TFTの特性)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 7:00
- ▶ 第8回 「薄膜トランジスタの原理と評価 (FETの理論)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 9:38
- ▶ 第9回 「誘電物性 (誘電体の応用と巨視的理論)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 9:14
- ▶ 第10回 「機器分析 (光学解析)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 10:36
- ▶ 第11回 「結晶化学 (Pauling則)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 8:17
- ▶ 第11回 「結晶化学 (Bond Valence Sum)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 19:28
- ▶ 第11回 「結晶化学 (わかりやすい結晶構造の描き方)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 8:56
- ▶ 第11回 「結晶学 (基本格子とブラベ格子)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 18:45
- ▶ 第11回 「結晶学 (ベクトル解析と格子変換)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 29:44
- ▶ 第11回 「結晶学 (逆格子と共変・反変テンソル)」 Google NotebookLMで生成した音声解説: 0:00 / 24:54

プログラミング

Audio guides were generated by Google NotebookLM

- ▶ pythonチュートリアル: 環境構築: Pythonとライブラリ
- ▶ pythonチュートリアル: 環境構築: Visual Studio Code
- ▶ pythonチュートリアル: Jupyter notebookを使ってpythonプログラムを動かす
- ▶ pythonチュートリアル: Fortran/Cとの比較で学ぶpython文法
- ▶ pythonチュートリアル: Debug: 全体の流れ
- ▶ pythonチュートリアル: Debug − Tracebackメッセージの読み方
- ▶ pythonチュートリアル: Debug − pylint
- ▶ pythonチュートリアル: Debug − printデバッグ
- ▶ pythonチュートリアル: Debug − デバッガ
- ▶ Vibeコーディング (難易度★): van der Pauw法の形状補正因子を例に
- ▶ Vibeコーディング (難易度★): 非線形最小二乗法
- ▶ Vibeコーディング(難易度★★★): 散乱モデルによる移動度の温度依存性のフィッティング (線形最小二乗法、非線形最小二乗法)
- ▶ Vibeコーディング (難易度★★★★): 半導体のキャリア密度の温度依存性のフィッティング (非線形最小二乗法)
- ▶ Vibeコーディング (難易度★★★★★): 薄膜XRDの非線形最小二乗法 (粒子群最適化)
- ▶ 生成AI+pythonチュートリアル: 良いプログラムに必要な機能とtemplateを用いた高機能プログラムの作成

チュートリアルページ: 生成AI

http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/?page=tutorial&id=ai

source HTML | display HTML

- 学会等講演
- プレゼンテーション
- 生成AI
- プログラミング
- 数値解析
- 結晶・回折・干渉
- 結晶・回折・干渉(内部資料)
- 物理・科学
- 半導体デバイス
- 半導体デバイス(内部限定)
- データ科学

D²MatE D²MatE Program Top This page

source HTML | display HTML

生成AI関連

Audio guides were generated by Google NotebookLM

- ▶ 安全衛生講習会: 生成AIの利用と注意 (対話バージョン:VOICEVOX 四国めたん&ずんだもん)
- ▶ 安全衛生講習会: 生成AIの利用と注意 (独話バージョン:VOICEVOX 四国めたん)
- ▶ 第3回 「生成AIの利用法と注意: Introduction (日本語)」 0:00 / 18:55
- ▶ Session 3: "How to Use Generative AI and Cautions: Introduction (English)" 0:00 / 17:21
- ▶ 第3回 「生成AIの利用と注意 (前半)」 0:00 / 7:34
- ▶ 第3回 「生成AIの利用と注意 (後半)」
- ▶ 生成AIの注意 ーハルシネーションと確証バイアスー
- ▶ 第3回 「生成AIの利用と注意 (著作権)」 0:00 / 8:44
- ▶ 第3回 「講義録画・録音ファイルと生成AIから教科書を作ろう (生成AIの注意と著作権)」 0:00 / 17:27
- ▶ 第4回 「生成AIの利用例: 一般的な質問と画像生成 (Part 1: 一般的な質問)」 0:00 / 6:39

自習・復習用AI: NotebookLM

http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/D2MatE_programs.html?page=notebooklm

NOTEBOOKLM (一般公開)

NotebookLM

公開対象: 学会参加者、講義聴講者等 (下記のAIの一部は、Tutorials - D2MatE の動画、資料を含んでいます)

- 物理・科学一般(量子力学、バンド理論、統計力学、固体科学、機器分析)
  (講義資料等: 固体化学、固体物理、統計力学(C)、機器分析概論、第一原理計算、半導体物理、デバイス関係、COE講義、チュートリアル)
  講義ページ 2024年度 Q3 統計力学

- 結晶工学スクール2025 バンド構造を用いた材料開発(実践編) (スクール資料・スライド、関連チュートリアル資料など)
  日本語解説 (NotebookLMで生成): ▶ 0:00 / 9:59
  2025年度 結晶工学スクール 関連資料

- 東京科学大学 物質理工学院 材料系 学部2年 講義
  セラミックス概論2025 「半導体・導電体材料」講義 (講義資料、2025年度講義音声)
  日本語解説 (NotebookLMで生成): ▶ 0:00 / 6:14
  2025/7/18 講義資料 Ceramics2025.pdf (2025/7/18 updated; 7/17 updated: 7/16 uploaded))

- 酸化物半導体の基礎 (AMFPD'25) (チュートリアル資料、関連論文含む)

- 東京科学大学 物質理工学院 材料系 修士1年 講義
  数値計算 (計算材料学特論) (講義資料・音声のみ)
  講義ページ: Computational Materials Science 2025

- 著作権・生成AIの注意・プログラミング一般 (講義・チュートリアル資料、関連公開資料・論文含む)

質問等について

- チュートリアルの各パートの最後に質問時間を設けます
- 講義中でも、Q&A に質問等を入れていただければ、
  適当なタイミングで回答するか、最後の質問時間に回答します

配布するプログラムに保証はありません

本チュートリアルで配布しているプログラムは、学習・理解を目的として作成した参考実装です。

一般的なデータ・解析用途に対して正確性や精度を保証することはできません。

あくまでも、参考プログラムと考えて、使用する場合は、
ユーザの責任で正確性・精度の検証をしてください

なお、すべてのプログラム・データはパブリックドメインとし、
再配布、二次利用は自由です。
クレジット表記も不要です。