

21COE 物質階層融合科学セミナー  
物性コロキウム

日時：6月1日(水) 16:30 - 18:00

場所：理学部 総合研究棟745号室(大学院講義室)

講師：杉野 治(東京大学物性研究所)

題目：電子・イオン系のダイナミックスの第一原理計算

要旨：

固体・液体等、凝縮系の物性を研究するための手法として密度汎関数理論に基づく第一原理計算が盛んに用いられるようになった。特に平面波擬ポテンシャル法は、分子動力学法と組み合わせることにより、物質の動力学的性質の理解に多大なる貢献をしてきた。この手法は、多体電子論と古典分子動力学の中間に位置しており、最近では、それぞれが関連を深めながらミクロからマクロ(連続体)を橋渡しする基盤技術の要素として発展している。この視点のもと本コロキウムでは、最近のテーマである表面界面構造、化学反応(電気化学反応)、励起、伝導、構造相転移等について紹介し、現状での問題点と将来発展させるべき方向性について議論したい。

連絡先：石原 純夫 (795-6436)

16:15 よりコーヒー、紅茶、お菓子を用意します。カップを持ってお集まり下さい。

世話人

松井 広志(795-6604)、 内田 就也(795-7756)、

高橋 隆(795-6417)

中島 龍也(795-6441)