

【電子・物理工学専攻セミナー】

日時：平成 31 年 9 月 6 日（金） 13:00 ~14:00

場所：3F 棟 800 号室

講演題目：「電子状態理論とマテリアルデザイン」

講演者：小林伸彦

所属：筑波大学数理物質系

概要：

材料合成技術の進歩により、原子・分子レベルで制御された高機能高性能物質材料開発が行われている。そのような材料開発研究を高効率に行うためには、物質のミクロな構造、結合状態、電子状態を、量子力学に基づいた精密理論により解析し、諸物性を理論的に予測して物質設計することが重要となってきた。そのための方法論として密度汎関数理論に基づく電子状態計算法が盛んに用いられ、物質の構造、電子状態、物質の特性を理論的に解析する手法として広く普及してきた。無機材料から有機材料までさまざまな物質系に適用され、原子配置、結晶構造、電子構造をはじめとして、電気的、磁気的性質の解析などが行われるとともに、近年のコンピュータの高性能化や一般への普及により、多くの材料研究者によって応用研究が行われてきた。一方で、さまざまな機能を精度良く予測するためには電子状態計算法の発展が不可欠で、理論研究者によって開発整備が進められている。本セミナーでは、我々の研究を通して、計算理論開発、電子状態解析、機能予測例の現状を紹介し、今後の展開について述べたい。

世話人：佐野 伸行