

## 応用数理工学セミナー

### 現在の電子状態計算の手法の能力と限界。 今後どう発展していくのか？

講師 小谷岳生 氏

(鳥取大学 工学研究科機械宇宙工学専攻 応用数理工学講座 教授)

日時 平成 21 年 4 月 17 日 (金) PM3:00-3:50

会場 鳥取大学工学部 3 階応用数理工学科第 2 ゼミ室

---

現在の物質科学においては、原子レベルでの詳細な制御が必要になってきている。たとえば、半導体の界面での仕事関数の制御、あるいは表面での触媒反応などにおいても、原子レベルで理解し制御していくことがこれからますます重要になってくる。

これを理論的側面からサポートする手法の中心となるのが「第一原理電子状態計算」である。たとえば、EXAFS や STM などの原子レベルの計測手法の結果を読み解くには、計算との比較が重要である。

現在の「第一原理電子状態計算の標準的手法」は  $sp$  電子の系や、金属など、場合によってはかなりの予言力を持つ方法である。しかしながら、一方で、その予想能力にはかなりの欠陥があることも知られている（計算しているひとはどうしても「いい結果」だけ見せる傾向にある）。とくに遷移金属酸化物などでは問題もおおい。わたしは「現在の標準的手法を越えて、汎用性が高く予言力の高い電子状態計算方法を開発すること。汎用性の高い計算コードの開発とその応用。」に主軸をおいて研究を行っている。その現状を時間の許す範囲で説明したい。

---

連絡先：星健夫 (hoshi@damp.tottori-u.ac.jp)

(鳥取大学 工学研究科機械宇宙工学専攻 応用数理工学講座)

(セミナー情報：<http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/semi.html>)