

大学院生発表会

10月7日(金) 4限 @理学部3号館D201
物理科学ゼミナールI・II
理学ゼミナール

秋好佑亮 (M2・下條研)

「第一原理分子動力学計算による金属-TiO₂の研究」

第一原理計算を用いたシミュレーションで得た金属-TiO₂モデルの界面の構造と電子状態の解析結果を紹介する。

入江 鮎 (D1・下條研)

「第一原理分子動力学法に基づく熱力学積分を用いたアルカリ金属混合系の融点の組成依存性」

量子力学的シミュレーションに基づいて行ったアルカリ金属二元合金を対象とした相転移現象の研究について発表する。

