2009年度冬学期 第4回 物性セミナー

「第一原理計算とマルチカノニカル法でみる物質構造相変化」

講師　吉本 芳英 氏 (東京大学物性研究所)
日時　2009年 11月 20日 (金) 午後4時30分～
場所　16号館 827

量子力学と統計力学はともに物性物理の基礎となっており、現実物質の理解には両者を同時に扱う必要がある。第一原理計算は、コンピュータを用いて電子の量子状態を写実的にシミュレートする手法であり、電子構造できまる物質の性質を調べる有力な手段である。しかしながら、その計算規模は大変大きい。そのために第一原理的精度で物質の統計的な振る舞いを調べることは困難となっている。

そこで吉本は統計力学のシミュレーション手法の一種であるマルチカノニカル法を第一原理計算と組み合わせる研究をしている。マルチカノニカル法は通常の方法に比べて系の緩和時間を短縮し、また広い温度範囲の熱力学量を同時に決めることができる興味深い方法である。この講演では、研究している手法を第一原理計算とマルチカノニカル法の簡単な説明から始めて解説し、またその応用例について述べる。

○今後の予定：

11月27日	堀田貴嗣氏 (首都大学東京大学院・理工学研究科) 「重い電子：遍歴と局在が織りなす古くて新しい問題」
12月4日	國仲寛人氏 (中央大学理工学部物理学科) 「微小系衝突に見られる異常反発」
12月18日	河野昌仙氏 (物質・材料研究機構) TBA
1月15日	高橋大輔氏 (理化学研究所) TBA
1月22日	上妻幹男氏 (東京工業大学 大学院理工学研究科)TBA

○物性セミナーのページ

http://huku.c.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/FSwiki/wiki.cgi/BusseiSeminar

物性セミナー世話人：加藤雄介　堺 和光　福島孝治　前田京剛　簔口友紀