

「密度汎関数法によるナノ・バイオ物質での新現象」

講演者氏名	押山 淳
所属	筑波大学物理学系
講演タイトル	「密度汎関数法によるナノ・バイオ物質での新現象」
講演概略	密度汎関数法による、ナノ・バイオ物質での予期せぬ新現象の予測あるいは実験的に見出された現象の機構解明についての、全エネルギー・電子構造計算及び自由エネルギー分子動力学計算を報告する。具体的には、半導体カーボンナノチューブの二重壁形成による金属化、半導体Si ナノ構造での磁性発現、リボザイムの自己切断機構解明、レーザー照射による結晶化、などを取り上げる。