



## 國外教授來訪學術演講「First-principles calculations based on density functional theory: Discovery of Weyl semimetal, real-space observation of orbital order, and absolute core-level binding energy」

時間：2019-03-12

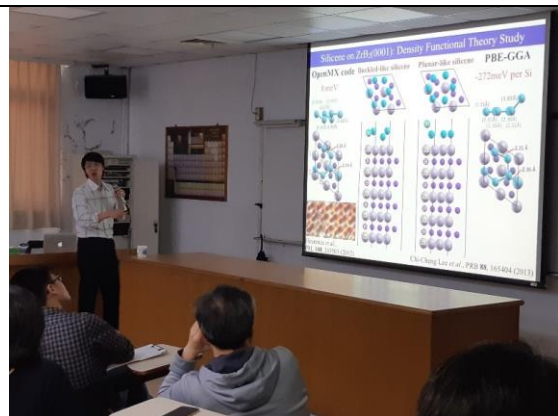
地點：S215

李啟正博士現任職於東京大學固態物理中心擔任研究員，從3月11日至13日，訪問淡江物理系，進行學術交流。李博士的專長是第一原理凝態理論計算，並在12日於S215進行一場演講，題目為「First-principles calculations based on density functional theory: Discovery of Weyl semimetal, real-space observation of orbital order, and absolute core-level binding energy」。

主要是介紹密度泛函理論的三個重要發展工作：1. 發現外爾(Weyl)半金屬 TaAs：利用第一原理計算，在 TaAs 晶體中，發現其準粒子遵守外爾方程式，並具備特殊拓樸性質，該工作獲 Physics World 雜誌評為 2015 年時大突破之一！2. 預測與發現超導材料中之軌域有序：結合第一原理密度泛函理論與實驗(STM)，證實超導材料(LaOFeAs、CeCoIn5 等)中，具有明顯之長距有序結構(包括：自旋有序與軌域有序)。3. 理論計算核心電子之結合能：透過第一原理計算直接計算材料中各原子之核心電子結合能，可以預測並解釋能譜實驗(例如：X 光光電子能譜)之結果。這場演講使參與的老師和同學們，對第一原理凝態理論計算之發展，以及如何結合最新理論方法與先進實驗技術，獲得更深入的瞭解。



國外教授李啟正演講實況 1



國外教授李啟正演講實況 2