

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **ŚRODĘ**

26 listopada 2008 r., o godz. 10:00

w sali 203 (bud. 1) odbędzie się seminarium, na którym

Dr Jacek PIECHOTA

ICM, Uniwersytet Warszawski

wygłosi referat na temat:

„Modelowanie *ab initio* wybranych materiałów tlenkowych”

W trakcie seminarium zostaną przedstawione wybrane wyniki obliczeń dla materiałów tlenkowych: spineli, ZnO i TiO₂. W przypadku spineli zostały policzone własności termodynamiczne defektów punktowych i dyfuzja wakansów tlenowych. Dla ZnO zbadano stabilność faz oraz odtworzono diagram fazowy. Z kolei dla TiO₂ zbadano wpływ korelacji elektronowej na stabilność faz oraz zbadano zjawisko adsorpcji prostych molekuł na powierzchni (101) fazy anatazu. W końcowej części seminarium zostaną przedstawione zasoby obliczeniowe, jakimi dysponuje ICM UW.

Serdecznie zapraszamy

Roman Puźniak

Henryk Szymczak

Andrzej Wiśniewski