

## I 固体表面電子状態シミュレーション用高速プログラムの開発

I.1 平面波展開法による第一原理分子動力学シミュレーションプログラムの開発

I.2 実空間差分法による第一原理分子動力学シミュレーションプログラムの開発

I.3 積分方程式法を用いた新しい計算手法の開発