

異分野基礎科学研究所
量子宇宙研究コアセミナー開催のお知らせ

「密度汎関数理論の基礎と
ナノカーボン系への応用」

日時： 2016年12月13日（火）10:00～

会場： 岡山大学津島キャンパス 理学部小会議室

講師： 齋藤 晋 氏
(東京工業大学理学院物理学系 教授)

【講演要旨】

半世紀前に量子力学の再定式化として提案された密度汎関数理論は、まず、凝縮系物理学分野からその適用がなされ、その後、量子化学を含む広範な分野で用いられ、今日に至っている。その呼称は、「基底状態粒子密度 $n(r)$ の汎関数として全ての物理量が与えられる」こと、即ち $0[n(r)]$ と表記できることに由来している。ここで注意すべきは、多くの人々に「基底状態の全ての物理量が基底状態粒子密度の汎関数として（原理的には）与えられる」と、限定的に誤って捉えられている点である。本セミナーでは、励起状態も含む全ての物理量が原理的には基底状態粒子密度の汎関数で与えられることをまず、指摘する。そして、密度汎関数理論の適用例として、フラーレン・ナノチューブ・グラフェンなどのナノカーボン系の幾何構造と電子構造の定量的予言研究について紹介する。

問い合わせ先：異分野基礎科学研究所 量子宇宙研究コア

吉村 太彦（内線 8499）