

---

## 2006年度夏学期 第5回 物性セミナー

---

### 「電子論に基づいた固体の定量的記述 – 密度汎関数理論とグリーン関数理論」

講師 三宅 隆 氏 (産業技術総合研究所)

日時 2006年6月2日(金) 午後4時30分～

場所 16号館 827

密度汎関数理論に基づいた電子状態計算は、物質の構造特性や電子物性を理解する強力な手段として定着している。経験パラメーターなしに種々の物理量を定量的に記述でき、実験で未到達な条件下での物性予言や、複雑で有効模型が容易に構成できない系での物性理解などで特に効力を発揮する。セミナーでは、密度汎関数理論の導入から始めて、現実の固体への適用例を交えて長所と問題点を議論する。特に、電子励起状態や電子間相互作用の強い系における困難を克服する試みとして、伝統的な多体問題の手法と融合させた研究の進展を紹介する。

#### 次回の予定

6月16日 多辺 由佳 氏 (早稲田大理工) 「液晶に見られる散逸構造」

6月23日 澤井 哲 氏 (ERATO 金子複雑系生命)

6月30日 藤谷 秀章 氏 (富士通研究所ナノテクノロジー研究センター)

「Computational drug design と非平衡統計力学」

#### 物性セミナーのページ

<http://huku.c.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/FSwiki/wiki.cgi/BusseiSeminar>

#### 駒場セミナーカレンダー (駒場内のみアクセス可)

<http://huku.c.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/webcal/webcal.cgi>

物性セミナー世話人：加藤雄介

福島孝治

簀口友紀

堺 和光