

応用物理学セミナー

2019年9月19日(木) 13:00-14:30 41番教室

拡張準粒子理論とその応用について

大野 かおる 教授

横浜国立大学 大学院工学研究院

第一原理計算で広く用いられている密度汎関数理論は、基底状態理論であり、電子励起状態を扱うことができない。一方、物質から電子を1個抜き去るのに必要なエネルギーは光電子スペクトルをなすが、この物質は中性の基底状態でなくても、任意の M 電子系の励起固有状態であってもよい。電子を1個付け加える場合も同様である。これらのスペクトルは理論的には準粒子スペクトルと呼ばれ、多体摂動論のグリーン関数法で扱うことができる。我々は、この準粒子理論を任意の M 電子系の電子励起固有状態の場合に拡張することに成功した[1]。この理論を分かりやすく紹介するとともに、それを用いて、電子励起ダイナミクス計算やX線放出スペクトル (XES) 計算などを行った例を紹介する。

[1] Kaoru Ohno, Shota Ono, and Tomoharu Isobe, J. Chem. Phys. **146**, 084108 (2017).

- ※ どなたでも参加できます。お気軽にご参加ください。
 - ※ 本セミナーは、応用数学物理領域の特別講義II「理論物性物理学」の最終回として開催されます。特別講義へのご参加も歓迎いたします。
- 9月17日 (火) 2限、3限、4限
9月18日 (水) 2限、3限、4限
9月19日 (木) 2限、3限 (セミナー)

連絡先：応用物理コース 小野 頌太 (shota_o@gifu-u.ac.jp)