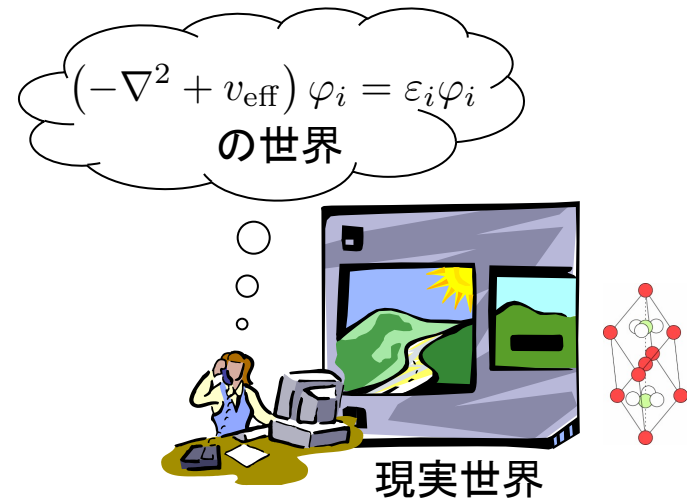


密度汎関数法の意味

大阪大学大学院工学研究科
赤井久純

問題

1. 現実世界とコーン・シャム方程式で表される世界の対応？
2. 局所密度近似はどこが近似？
3. よりよい近似の方向性は？



- 密度汎関数法を基礎にコーン・シャム方程式をつくと問題は一体化する.
- 正しい交換相関エネルギーがわかったとすると問題は解けたことになる.
- 一体何を解いたことになるのか？
- コーン・シャム世界の粒子と準粒子
- 正しい交換相関エネルギーはわからないので局所密度近似(GGAも含めて)が使われる.
- 局所的に一樣電子ガスであるとみなすのは正当. どこが近似なのか？

