

平成 29 年 9 月 4 日

## 集中講義のお知らせ

- 題目 液体の密度汎関数理論
- 講師 墨 智成 (岡山大学異分野基礎科学研究所・准教授)
- 対象学年 学類 4 年 (特別講義)  
修士 1, 2 年 (計算科学特別講義)
- 日程 12 月 11 日 (月) 4, 5 限  
12 月 12 日 (火) 2, 3, 4 限  
12 月 13 日 (水) 2, 3, 4 限
- 講義室 自然科学 5 号館 3 講 (但し 13 日 (水) 2 限のみ 2 講)
- 講義予定
1. 密度汎関数理論の概要
  2. 大分配関数と汎関数微分
  3. 密度分布関数と対相関関数
  4. 単純液体の密度汎関数理論
  5. Percus の関係式と Hypernetted-chain 積分方程式
  6. 分子性液体の密度分布関数と対相関関数
  7. 分子性液体の密度汎関数理論
  8. 溶媒和自由エネルギー
- 参考書  
J.-P. Hansen and I. R. McDonald  
“Theory of Simple Liquids” (Second edition)  
Academic Press, 1990.
- 問合せ先 数物科学類計算科学コース 三浦 伸一