

目 次

第 1 章 背景と導入	1
1.1 背景	1
1.2 導入	2
1.2.1 本書の学習方法	2
第 2 章 多電子系と独立粒子系	5
2.1 多電子系の基本的な性質	5
2.1.1 同種粒子多体系	6
2.1.2 Born–Oppenheimer 近似	7
2.1.3 ビリアル定理	10
2.1.4 電子系のハミルトニアン	11
2.1.5 1 電子近似	12
2.2 Hartree–Fock (HF) 近似	14
2.2.1 期待値の評価	14
2.2.2 Hartree–Fock (HF) 方程式	17
2.2.3 配置間相互作用 (CI), 結合クラスター (CC)	19
2.3 密度汎関数理論 (DFT)	23
2.3.1 Hohenberg–Kohn の定理	23
2.3.2 Kohn–Sham 理論	25
2.3.3 時間依存密度汎関数理論 (TDDFT)	29

2.4	様々な密度汎関数	32
2.4.1	局所密度近似 (LDA)	32
2.4.2	一般化勾配近似 (GGA)	35
2.5	汎関数の拡張	37
2.5.1	自己相互作用補正 (SIC)	37
2.5.2	LDA + U , GGA + U	39
2.5.3	ハイブリッド汎関数	41

第3章 第一原理計算の基本 45

3.1	周期系の取り扱い	45
3.1.1	単位胞と逆格子	46
3.1.2	平面波と局在関数	51
3.2	基底関数での展開	56
3.2.1	LCAO 法	56
3.2.2	混合基底法	60
3.2.3	擬ポテンシャル法	63
3.3	マフィンティン近似を用いる方法	67
3.3.1	APW 法	68
3.3.2	KKR 法	73
3.4	基底状態ダイナミクス	75
3.4.1	力の計算, Car-Parrinello 法	76
3.4.2	その他の第一原理分子動力学法と構造最適化	78
3.5	非断熱過程のダイナミクス	80
3.5.1	非断熱過程	81
3.5.2	原子核間の多体相関	83

第4章 応答とスペクトル 87

4.1	摂動計算	87
4.1.1	有効質量	87
4.1.2	誘電率, f 総和則	89
4.1.3	反磁性帯磁率・NMR 化学シフト	96
4.2	線形応答	100
4.2.1	フォノン	100
4.2.2	電子格子相互作用, ポーラロン, 赤外吸収, Raman 散乱	104
4.2.3	電気伝導度	108
4.2.4	熱伝導度	113
4.3	スピン相互作用	117
4.3.1	Pauli 常磁性と Landau 反磁性, スピン軌道相互作用	117
4.3.2	超微細 (hyperfine) 構造	119

第5章 準粒子描像 123

5.1	拡張準粒子理論	123
5.1.1	拡張準粒子の概念	124
5.1.2	拡張準粒子 (EQP) 方程式	129
5.1.3	多体摂動論	132
5.1.4	Hedin の式	140
5.2	GW 近似と Bethe–Salpeter 方程式	143
5.2.1	GW 近似	143
5.2.2	Bethe–Salpeter 方程式	150
5.2.3	T 行列理論, Hubbard U , Auger スペクトル	159
5.2.4	自己無撞着 GWT 法	165
5.2.5	Parquet 法	167

第 6 章 まとめと展望	169
6.1 拡張 Kohn-Sham 理論と拡張準粒子理論	170
6.1.1 準粒子波動関数の規格化	170
6.1.2 Baym-Kadanoff の保存則	171
6.1.3 高橋-Ward 恒等式, まとめ	172
6.2 今後の展望	174
付録 A Fermi 粒子系の第 2 量子化	175
付録 B 第一原理計算ソフト	179
参考文献	181
索 引	186