

講義題目	第一原理電子状態計算の基礎と応用		
担当教員	尾崎 泰助	教室	Zoomを利用したオンライン講義
定員	50名程度	言語	日本語
単位数	なし	授業の形式	講義及び議論
開講日時 2020年9月開講 90分×8回	9月 4日(金)： 第1回 14:00-15:30、第2回 15:45-17:15 9月11日(金)： 第3回 14:00-15:30、第4回 15:45-17:15 9月18日(金)： 第5回 14:00-15:30、第6回 15:45-17:15 9月25日(金)： 第7回 14:00-15:30、第8回 15:45-17:15		
講義概要	密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算の基礎と応用に関して講義を行う。固体における物質の凝集機構と電子状態から議論を始め、現実物質の物理・化学的性質の包括的な理解の枠組みを与える密度汎関数理論と線形応答理論の基本概念及びその定式化を解説する。また、密度汎関数理論の応用として、構造の安定性、反応座標解析、磁気特性、光との相互作用、内殻励起現象等に関して応用事例と共に議論する。 第一原理計算プログラムopenMXの簡単なチュートリアルも実施する予定である。		
講義内容 (若干内容変更の可能性あり)	<p>【第1回】物質の構造と凝集機構：ピリアル定理と凝集機構の関係、Friedelモデルによる遷移金属の構造傾向の理解、モーメント定理と局所構造の関係</p> <p>【第2回】結晶構造とバンド構造：Born-von Karman条件による周期性の導入、Blochの定理・空格子近似と「ほとんど自由な電子」近似、直交化平面波の方法</p> <p>【第3回】密度汎関数理論 I：第二量子化の方法・ジェリウムモデル・ジェリウムモデルにおける交換相関エネルギー・Thomas-Fermiモデル</p> <p>【第4回】密度汎関数理論 II：Hohenberg-Kohnの定理、電子密度の<math>v</math>-および<math>N</math>-表示可能性、Levyによる制約条件付き最小化の方法、Kohn-Shamの方法、Kohn-Sham法における全エネルギーの変分特性、交換相関エネルギー：LDA及びGGA、擬ポテンシャル法</p> <p>【第5回】密度汎関数理論の応用I：構造最適化と構造安定性の解析、第一原理分子動力学法：温度制御及び圧力制御、NEB法の原理と反応経路解析、オーダー<math>N</math>・大規模第一原理電子状態計算の手法と応用</p> <p>【第6回】密度汎関数理論の応用II：局在スピンと遍歴電子の常磁性、強磁性及び反強磁性体に対するWeissモデル、直接交換及び超交換相互作用、磁氣的局所力の定理に基づく有効交換相互作用パラメータの計算、強磁性体のCurrie温度の第一原理計算</p> <p>【第7回】密度汎関数理論の応用III：Lorentzモデルによる物質と光の相互作用、線形応答理論：久保-Greenwoodの公式、光学伝導度・複素誘電関数・屈折率の第一原理計算</p> <p>【第8回】密度汎関数理論の応用IV：固体表面の仕事関数、光電子分光法の物理過程、固体中の内殻電子の絶対束縛エネルギーの第一原理計算、角度分解光電子法の物理過程、バンドアンフォールディング法によるバンド構造の解析、X線内殻励起吸収スペクトルの第一原理計算</p>		
受講対象	本プログラム「高度人材育成事業」にご入会の企業（＝連携機関）所属の方、学部・博士課程（前期/後期）学生、国立研究機関等に所属する研究者		
履修にあたり必要な知識	学部4年生程度の量子力学及び固体物理学の知識		
履修上の注意	事前申込制。受講生が定員を大幅に上回る場合は、連携機関所属の方を優先し、その他は先着順とする。		
講義資料	指定のURLからダウンロード		
参考書	物質の電子状態 上・下 R.M. マーチン(著), 寺倉清之(編集), 寺倉郁子(編集), 善甫康成(編集)		