

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	60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 2021年9月開講 90分×8回	9月 3日(金)： 第1回 14:00-15:30、第2回 15:45-17:15 9月10日(金)： 第3回 14:00-15:30、第4回 15:45-17:15 9月17日(金)： 第5回 14:00-15:30、第6回 15:45-17:15 9月24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、電子伝導特性、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： 簡単な分子の計算事例、ペ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： DOSとグリーン関数・リカーゾン法、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、結晶運動量</p> <p>【第3回】密度汎関数理論 I： Hartree-Fock法、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、Lindhard応答関数</p> <p>【第4回】密度汎関数理論 II： Hohenberg-Kohnの定理、電子密度のv-およびN-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、DFT-KS法における変分特性</p> <p>【第5回】密度汎関数理論の実装：Kohn-Sham方程式の数値解法、OpenMXの実装、LCPAO法、基底関数と全エネルギーの計算、DFT計算の再現性に向けた試み、擬ポテンシャル法</p> <p>【第6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N・大規模第一原理電子状態計算の手法と応用</p> <p>【第7回】密度汎関数理論の応用II：拡散/バリスティック伝導、非平衡グリーン関数法、量子化コンダクタンス、一次元鎖のモデル、三次元系への拡張とDFT-NEGF法、グラフェンナノリボンの伝導特性</p> <p>【第8回】密度汎関数理論の応用III：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	1) 「高度人材育成事業」にご入会の企業(=連携機関)に所属の方(有料) 2) 学部学生、修士・博士課程学生、大学・国立研究機関等に所属する研究者等(無料)		
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	受講生が定員を大幅に上回る場合は、1) 連携機関としてお申込みの企業の方、2) 博士課程学生、3) 修士課程学生および学部生、4) 大学・国立研究機関等に所属する研究者等の優先順位とする。		
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)		