

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 開催
定員	100 名	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 2026 年 2 月開講 90 分×8 回	2 月 10 日(火)： 第 1 回 14:00-15:30、第 2 回 15:45-17:15 2 月 18 日(水)： 第 3 回 14:00-15:30、第 4 回 15:45-17:15 2 月 25 日(水)： 第 5 回 14:00-15:30、第 6 回 15:45-17:15 3 月 4 日(水)： 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、ワニエ関数、ベリー位相、線形・非線形光学応答、X 線内殻励起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)	【第 1 回】物質の構造と凝集機構： 簡単な分子の計算事例、ビ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 【第 2 回】結晶構造とバンド構造： DOS とグリーン関数・リカージョン法、Born-von Karman 条件による周期境界条件、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、ワニエ関数、ベリー接続・曲率 【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 【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、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 【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、擬ポテンシャル法、DFT 計算の再現性 【第 6 回】密度汎関数理論の応用 I: 構造最適化、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 【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、DFT-NEGF 法、Boltzmann 方程式と熱電特性 【第 8 回】密度汎関数理論の応用 III: 内殻電子の絶対束縛エネルギー計算と XPS、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、線形・非線形光学応答の第一原理計算		
受講対象	本プログラムの連携企業に所属の方、学部学生、修士・博士課程学生、博士研究員等		
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	受講生が定員を上回る場合は、1) 連携企業の方、2) 博士課程学生、3) 修士課程学生、4) 博士研究員の優先順位とする。		
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 原書 2 版上・下, R.M. マーチン(著), 寺倉清之(翻訳), 寺倉郁子(翻訳)		