

目次

第1章	量子力学の基礎	1
1.1	Schrödinger 方程式	1
1.2	基底状態に関する変分原理	3
1.3	Hartree-Fock 近似	5
1.4	相関エネルギー	12
1.5	電子密度	13
1.6	Hellmann-Feynman の定理とビリアル定理	15
第2章	密度行列	19
2.1	量子状態の記述と Dirac の記法	19
2.2	密度演算子	24
2.3	Fermi 粒子系の簡約化密度行列	27
2.4	スピンなしの密度行列	33
2.5	密度行列形式による Hartree-Fock 理論	36
2.6	簡約化密度行列の N 表示可能性	42
2.7	統計力学	45
第3章	密度汎関数理論	49
3.1	オリジナルアイデア — Thomas-Fermi モデル —	49
3.2	Hohenberg-Kohn の定理	53
3.3	電子密度の v 表示可能性と N 表示可能性	55
3.4	Levy による制限つき探策の方式	58
3.5	有限温度カノニカルアンサンブルの理論	63
3.6	有限温度グランドカノニカルアンサンブルの理論	66
3.7	古典的な系に対する有限温度アンサンブルの理論	69

第4章	化学ポテンシャル	73
4.1	温度ゼロのグランドカノニカルアンサンブルにおける化学ポテンシャル	73
4.2	化学ポテンシャルの物理的な意味	77
4.3	温度ゼロ付近のグランドカノニカルアンサンブルについての詳細な考察	78
4.4	純粋状態およびカノニカルアンサンブルにおける化学ポテンシャル	86
4.5	討論	88
第5章	化学ポテンシャルの微分	91
5.1	基底状態の変更	91
5.2	電気陰性度とその均等化	94
5.3	硬さと軟らかさ	100
5.4	反応性指数 — Fukui 関数 —	103
5.5	局所的な軟らかさ, 局所的な硬さ, 軟らかさと硬さの核	106
第6章	Thomas-Fermi と関連のモデル	111
6.1	伝統的な TF モデルと TFD モデル	111
6.2	計算方法	116
6.3	Thomas-Fermi 理論からの 3 つの派生定理	121
6.4	評価と修正	123
6.5	他の方法による導出と Gauss 関数モデル	125
6.6	純粋に局所的なモデル	131
6.7	通常の密度勾配補正	134
6.8	Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker モデル	140
6.9	その他の考慮すべき事項	144
第7章	Kohn-Sham 法 — 基本原理 —	151
7.1	軌道の導入と Kohn-Sham 方程式系	151
7.2	Kohn-Sham 方程式系の導出	155
7.3	さらに運動エネルギー汎関数について	159
7.4	局所密度と X_α 近似	163
7.5	積分による定式化	168
7.6	整数でない占有数への拡張と遷移状態の概念	174
第8章	Kohn-Sham 法 — 詳細 —	181
8.1	スピン密度汎関数理論	181

8.2	スピン密度汎関数と局所スピン密度近似	186
8.3	自己相互作用補正	193
8.4	Hartree-Fock-Kohn-Sham 法	197
8.5	交換-相関正孔による交換-相関エネルギー汎関数	200
8.6	波数ベクトル分析による交換-相関エネルギー汎関数	208
8.7	交換-相関エネルギー汎関数についてのその他の研究	211
第9章	理論の拡張	215
9.1	有限温度 Kohn-Sham 理論	215
9.2	励起状態	218
9.3	時間依存をもつ系	222
9.4	動的線形応答	224
9.5	密度行列汎関数理論	227
9.6	電子系以外の系と多成分系	230
第10章	原子・分子の視点	233
10.1	化学結合の問題に対する見解	233
10.2	原子間の力	234
10.3	分子内の原子	237
10.4	HSAB 原理についての補遺	240
10.5	化学結合のモデル — 結合電荷モデル	244
10.6	半経験的密度汎関数理論	250
第11章	補遺	255
11.1	スケーリングの関係	255
11.2	エントロピー最大化による密度汎関数理論の導出	257
11.3	その他の話題	261
11.4	おわりに	263
付録 A	汎関数	265
付録 B	凸関数と凸汎関数	273
付録 C	Fermi 粒子の第二量子化	279
付録 D	Wigner 分布関数と \hbar 半古典展開	285

x 目次

付録 E 一様な電子ガス	291
付録 F 電気陰性度と硬さの表	297
付録 G 密度汎関数理論の総説文献	303
参考文献	307
索引	337

