

# 目次

<b>第 I 部 基礎理論編</b>	<b>1</b>
<b>第 1 章 密度汎関数法と局所近似</b>	<b>3</b>
はじめに . . . . .	4
1.1 密度汎関数法 . . . . .	6
1.2 ホーエンベルク-コーンの定理 . . . . .	7
1.3 コーン-シャム方程式 . . . . .	9
1.4 変分の拡張 . . . . .	11
1.5 交換相関エネルギー . . . . .	15
1.6 局所密度近似 . . . . .	17
1.7 スピン密度汎関数法 . . . . .	21
1.8 まとめ . . . . .	24
<b>第 2 章 密度汎関数理論の発展</b>	<b>27</b>
2.1 一般化された密度汎関数理論 . . . . .	27
2.1.1 はじめに . . . . .	27
2.1.2 基本変数の選択 . . . . .	28
2.1.3 拡張された制限付き探索理論 . . . . .	31
2.1.4 交換相関エネルギー汎関数の開発 . . . . .	33
2.1.5 展望 . . . . .	36
2.2 相補的研究としての多体論—波動関数理論 . . . . .	40
2.2.1 波動関数と波動方程式 . . . . .	40
2.2.2 ハートリー-フォック法 . . . . .	41
2.2.3 変分モンテカルロ法とトランスコレイティッド法 . . . . .	45
2.3 量子モンテカルロ法による多体波動関数理論の展開 . . . . .	49

2.3.1	手法原理の概略	50	2.1.3	メタダイナミクス法	132
2.3.2	研究分野の位置付けと進展	53	2.1.4	物質科学への応用	134
2.3.3	実用化に向けた方法論開発	57	2.1.5	バイオ科学への応用	137
2.3.4	どのような量が計算されるのか?	60	2.2	オーダー N を目指して	141
2.4	相補的研究としての多体論— 多体摂動論	66	2.2.1	はじめに: なぜオーダー N 法?	141
2.4.1	断熱近似下の第一原理系とその解法の概観	66	2.2.2	オーダー N 法第一原理計算手法	141
2.4.2	密度汎関数理論の特異性と多体理論の目的	68	2.2.3	オーダー N 法による応用計算例	154
2.4.3	摂動展開の一般論: 連結クラスター定理	69	2.2.4	まとめ: オーダー N 法の実現に向けて	160
2.4.4	電子密度と 1 電子温度グリーン関数	72	2.3	時間依存密度汎関数理論	163
2.4.5	自己エネルギーとダイソン方程式	73	2.3.1	理論の概要	163
2.4.6	骨格図形	75	2.3.2	線形応答と密度-密度応答関数	166
2.4.7	ラッティンジャーワード理論	76	2.3.3	光応答の実時間計算	170
2.4.8	長距離クーロン系における多体理論の要諦	78	2.3.4	電子の非線形ダイナミクス	173
2.4.9	有効ポテンシャル展開法	79	2.3.5	おわりに	177
2.5	GW 近似とその展開	83	2.4	不規則系	179
2.5.1	密度汎関数理論 (DFT) に基づく電子構造理論の問題点	83	2.4.1	コヒーレントポテンシャル近似	180
2.5.2	GW 近似	90	2.4.2	計算の例: NiMn 合金	182
2.5.3	今後の展開	100	2.4.3	その他の応用	186
<b>第 II 部 計算手法編</b>		<b>105</b>	<b>第 III 部 応用編</b>		<b>191</b>
<b>第 1 章</b>	<b>バンド理論</b>	<b>107</b>	<b>第 1 章</b>	<b>半導体への応用</b>	<b>193</b>
1.1	バンド理論の基礎	108	1.1	プロセス設計	193
1.2	各種計算方法	113	1.1.1	不純物の固溶限	194
1.3	実験との照合	115	1.2	ドナー・アクセプター概念	195
1.4	バンド理論の限界と全電子の見方	116	1.2.1	不純物準位	197
<b>第 2 章</b>	<b>計算手法の発展</b>	<b>127</b>	1.2.2	格子間シリコンの例	198
2.1	カー-パリネロ分子動力学法	127	1.3	格子欠陥の同定	201
2.1.1	分子動力学法と密度汎関数理論	127	1.3.1	DX センター	201
2.1.2	カー-パリネロ法のアイデア	130	1.3.2	自己補償効果	205

1.4	新材料開発	206	4.5	最近の高圧研究から	266
<b>第2章</b>	<b>磁性と伝導の制御</b>	<b>209</b>	4.6	高圧物質合成と新物質	270
2.1	物質の磁性の起源	209	4.7	おわりに	271
2.2	基底状態の磁気構造	210	<b>第5章</b>	<b>強誘電体・圧電体への応用</b>	<b>275</b>
2.2.1	局所磁気モーメントが発達した系	211	5.1	誘電体の基礎	275
2.2.2	金属的磁性	216	5.1.1	誘電率と電気分極	275
2.3	磁性の制御	219	5.1.2	電気双極子と電気分極	277
2.4	物質の電気伝導	220	5.2	常誘電体, 強誘電体, 圧電体, 焦電体	277
2.5	電気伝導率計算の例	224	5.3	誘電体の電子論	279
2.6	電気伝導の制御	227	5.3.1	断熱ポテンシャルと格子振動	279
2.7	まとめ	228	5.3.2	巨視的電気分極	281
<b>第3章</b>	<b>スピントロニクス応用</b>	<b>231</b>	5.4	BaTiO <sub>3</sub> の電子状態と強誘電性	282
3.1	不揮発スピンメモリ	231	5.4.1	電子状態の特徴	283
3.1.1	結晶化 MgO 障壁による高出力化	232	5.4.2	常誘電相の不安定化	284
3.1.2	ハーフメタル電極による高出力化	233	5.4.3	不安定化の機構	284
3.1.3	原子配列不規則化の影響	235	5.4.4	寛容因子	287
3.1.4	異種材料接合界面の影響	236	5.4.5	電気分極の増大とポルンの有効電荷	287
3.1.5	不揮発スピンメモリの課題と展望	238	5.4.6	Pb の役割	289
3.2	強磁性半導体	238	5.5	圧電性	289
3.2.1	キャリア誘起強磁性	239	5.6	おわりに	291
3.2.2	室温強磁性半導体の理論設計	241	<b>第6章</b>	<b>表面反応, ナノ構造の制御</b>	<b>293</b>
3.2.3	強磁性半導体の課題と展望	245	6.1	概要	293
<b>第4章</b>	<b>高圧物理と第一原理計算, 物性と構造予測から物質合成へ</b>	<b>253</b>	6.2	量子反応シミュレーション計算法	294
4.1	高圧実験技術の進歩	254	6.3	白金燃料極における原子スケール反応ダイナミクス	295
4.2	高圧物性研究での第一原理計算の役割	256	6.3.1	水素分子の解離吸着	295
4.3	高圧構造決定	258	6.3.2	水素原子の拡散	301
4.3.1	構造探索に伴う困難	258	6.4	まとめ	307
4.4	最近の高圧構造探索	259	<b>第7章</b>	<b>不均一触媒反応過程の第一原理シミュレーション</b>	<b>311</b>
4.4.1	メタダイナミクス法	261	7.1	触媒	311

7.2	フロンティア軌道 . . . . .	314
7.3	CO 分子の吸着エネルギー . . . . .	317
7.4	吸着エネルギーと触媒反応性 . . . . .	321
7.5	反応の活性サイトの同定: TiO <sub>2</sub> (110) 表面上のギ酸分解 . . . . .	322
7.6	電極反応シミュレーション . . . . .	324
<b>第 8 章</b>	<b>生体反応の量子ハイブリッド分子動力学シミュレーション</b>	<b>327</b>
8.1	生体反応のコンピュータ・シミュレーション . . . . .	327
8.2	ハイブリッド QM/MM 計算スキーム . . . . .	328
8.3	生体高分子のシミュレーション . . . . .	332
8.4	酵素反応の QM/MM MD 計算 . . . . .	335
8.5	新しい生体触媒反応機構 . . . . .	337
8.6	第一原理計算による新しい生命進化理論へ向けて . . . . .	338
<b>第 IV 部</b>	<b>物理を超えて</b>	<b>345</b>
<b>第 1 章</b>	<b>計算機マテリアルデザインの社会学</b>	<b>347</b>
1.1	20 世紀の物理学の歴史 . . . . .	347
1.2	21 世紀の物理学としての計算機ナノマテリアルデザイン . . . . .	349
1.3	21 世紀の産業構造と計算機ナノマテリアルデザイン . . . . .	352
1.4	創エネルギー・ナノマテリアルデザイン . . . . .	353
1.5	ナノ超構造による超高効率太陽電池のデザイン . . . . .	356
1.6	超高効率人工光合成法のデザイン . . . . .	357
1.7	カルコパイライト型太陽電池の欠陥修復制御法 . . . . .	358
1.8	透明伝導酸化物のデザインと実証 . . . . .	360
1.9	半導体ナノスピントロニクス of 計算機ナノマテリアルデザインと実証 . . . . .	362
1.10	まとめ . . . . .	363
<b>索引</b>		<b>367</b>