

# 目次

まえがき	<i>iii</i>
謝辞	<i>vii</i>
日本語版へのまえがき	<i>ix</i>
記号の説明	<i>xi</i>
<b>第 I 部 概論と歴史的背景</b>	<b>1</b>
<b>第 1 章 序</b>	<b>3</b>
1.1 量子論と電子状態の起源	4
1.2 定量的な計算の出現	10
1.3 最大の挑戦, 電子相関	14
1.4 最近の発展	15
<b>第 2 章 概観</b>	<b>19</b>
2.1 電子の基底状態, 結合と特徴的構造	21
2.2 最も基本的な変数としての体積, あるいは圧力	26
2.3 弾性: 応力とひずみの関係	32
2.4 磁性と電子-電子相互作用	34
2.5 フォノンと変位型相転移	37
2.6 熱的性質: 固体, 液体, および相図	42
2.7 原子の運動: 拡散, 反応, 触媒作用	46
2.8 表面, 界面, 欠陥	48
2.9 ナノ材料: 分子と凝縮物質の間で	53
2.10 電子励起: バンドとバンドギャップ	58

2.11	電子励起：熱容量, 電気伝導率, 光学スペクトル . . . . .	65	7.3	$E_{xc}, V_{xc}$ および交換相関正孔 . . . . .	195
2.12	MgB <sub>2</sub> の例：バンド, フォノン, 超伝導 . . . . .	68	7.4	固有値の意味 . . . . .	201
2.13	さらに続く挑戦：電子相関 . . . . .	72	7.5	厳密な Kohn–Sham 理論の難しさ . . . . .	202
<b>第 3 章</b>	<b>理論の背景</b> . . . . .	<b>75</b>	7.6	時間依存密度汎関数論 . . . . .	206
3.1	相互作用のある電子と核の基礎方程式 . . . . .	75	7.7	Kohn–Sham 法のその他の一般化について . . . . .	208
3.2	凝縮物質における Coulomb 相互作用 . . . . .	80	<b>第 8 章</b>	<b>交換と相関の汎関数</b> . . . . .	<b>213</b>
3.3	力と応力の定理 . . . . .	81	8.1	局所スピン密度近似 (LSDA) . . . . .	214
3.4	統計力学と密度行列 . . . . .	85	8.2	一般化勾配近似 (GGA) . . . . .	216
3.5	独立電子近似 . . . . .	87	8.3	ポテンシャル $V_{xc}^{\sigma}(\mathbf{r})$ の LDA および GGA 表式 . . . . .	220
3.6	交換と相関 . . . . .	93	8.4	ノンコリニアスピン密度 . . . . .	223
3.7	摂動論と「 $2n + 1$ 定理」 . . . . .	98	8.5	非局所的密度の定式化：ADA と WDA . . . . .	224
<b>第 4 章</b>	<b>周期性固体と電子のバンド</b> . . . . .	<b>105</b>	8.6	軌道依存汎関数 I：SIC と LDA+U . . . . .	225
4.1	結晶の構造：格子 + 基底 . . . . .	105	8.7	軌道依存汎関数 II：OEP と EXX . . . . .	227
4.2	逆格子と Brillouin ゾーン . . . . .	116	8.8	ハイブリッド汎関数 . . . . .	231
4.3	励起と Bloch の定理 . . . . .	122	8.9	汎関数のテスト . . . . .	233
4.4	時間反転と反転対称性 . . . . .	127	<b>第 9 章</b>	<b>Kohn–Sham 方程式を解く</b> . . . . .	<b>241</b>
4.5	点対称 . . . . .	129	9.1	自己無撞着連立 Kohn–Sham 方程式 . . . . .	241
4.6	Brillouin ゾーンにおける積分と特殊積分点 . . . . .	131	9.2	全エネルギー汎関数 . . . . .	243
4.7	状態密度 . . . . .	136	9.3	自己無撞着の達成 . . . . .	251
<b>第 5 章</b>	<b>一様電子ガスと単純金属</b> . . . . .	<b>141</b>	9.4	力と応力 . . . . .	255
5.1	相互作用のない近似と Hartree–Fock 近似 . . . . .	143	<b>第 III 部</b>	<b>原子についての予備知識</b> . . . . .	<b>261</b>
5.2	相関正孔とエネルギー . . . . .	151	<b>第 10 章</b>	<b>原子の電子状態</b> . . . . .	<b>263</b>
5.3	sp 結合金属における結合 . . . . .	156	10.1	1 電子動径 Schrödinger 方程式 . . . . .	263
5.4	励起と Lindhard 誘電関数 . . . . .	159	10.2	独立粒子方程式：球対称ポテンシャル . . . . .	266
<b>第 II 部</b>	<b>密度汎関数論</b> . . . . .	<b>165</b>	10.3	開殻原子：非球対称ポテンシャル . . . . .	268
<b>第 6 章</b>	<b>密度汎関数論の基礎</b> . . . . .	<b>167</b>	10.4	相対論的 Dirac 方程式とスピン–軌道相互作用 . . . . .	271
6.1	Thomas–Fermi–Dirac 近似：汎関数の一例 . . . . .	169	10.5	原子の状態：遷移金属元素 . . . . .	275
6.2	Hohenberg–Kohn の定理 . . . . .	170	10.6	$\Delta$ SCF：電子の付加, 除去, および相互作用エネルギー . . . . .	278
6.3	拘束付き探索に基づく密度汎関数論の定式化 . . . . .	175	10.7	固体における原子球近似 . . . . .	280
6.4	Hohenberg–Kohn の定理の拡張 . . . . .	178	<b>第 11 章</b>	<b>擬ポテンシャル</b> . . . . .	<b>285</b>
6.5	厳密な密度汎関数の複雑さ . . . . .	182	11.1	散乱振幅と擬ポテンシャル . . . . .	286
6.6	密度から議論を進める困難さ . . . . .	185	11.2	直交化平面波 (OPW) と擬ポテンシャル . . . . .	289
<b>第 7 章</b>	<b>Kohn–Sham の補助系</b> . . . . .	<b>189</b>	11.3	モデルイオンポテンシャル . . . . .	294
7.1	ある問題を他の問題と置き換える . . . . .	189	11.4	ノルム保存擬ポテンシャル (NCP) . . . . .	297
7.2	Kohn–Sham の変分方程式 . . . . .	193	11.5	$l$ -依存ノルム保存擬ポテンシャルの生成 . . . . .	300

11.6	価電子の寄与の除去と内殻補正 . . . . .	305
11.7	転用可能性と硬さ . . . . .	307
11.8	分離可能な擬ポテンシャル演算子と射影演算子 . . . . .	308
11.9	ノルム保存の拡張：線形の範囲を越えて . . . . .	310
11.10	ウルトラソフト擬ポテンシャル . . . . .	311
11.11	射影演算子補強波 (PAW) 法：全電子波動関数の使用 . . . . .	314
11.12	その他の話題 . . . . .	317
<b>付録A</b>	<b>汎関数</b> . . . . .	<b>323</b>
A.1	基本的な定義と変分方程式 . . . . .	323
A.2	密度汎関数法で使われる勾配を含んだ汎関数 . . . . .	324
<b>付録B</b>	<b>LSDA と GGA 汎関数</b> . . . . .	<b>327</b>
B.1	局所スピン密度近似 (LSDA) . . . . .	327
B.2	一般化勾配近似 (GGA) . . . . .	329
B.3	GGA の例, PBE の具体的表式 . . . . .	329
<b>付録J</b>	<b>散乱と位相のずれ</b> . . . . .	<b>331</b>
J.1	球対称ポテンシャルによる散乱と位相のずれ . . . . .	331
<b>付録K</b>	<b>有用な関係式と公式</b> . . . . .	<b>335</b>
K.1	球 Bessel, 球 Neumann および球 Hankel 関数 . . . . .	335
K.2	球面調和関数と Legendre 多項式 . . . . .	336
K.3	実球面調和関数 . . . . .	337
K.4	Clebsch–Gordan および Gaunt 係数 . . . . .	337
K.5	Chebyshev 多項式 . . . . .	339
<b>付録O</b>	<b>単位とその変換係数</b> . . . . .	<b>341</b>
	<b>上巻の参考文献</b> . . . . .	<b>343</b>
	<b>訳者あとがき</b> . . . . .	<b>369</b>
	<b>索引</b> . . . . .	<b>373</b>