

# 目次

|                                    |           |
|------------------------------------|-----------|
| <b>第 IV 部 電子状態の決定, 3つの基本的な方法</b>   | <b>1</b>  |
| <b>第12章 平面波とグリッド：基本事項</b>          | <b>7</b>  |
| 12.1 平面波を基底とした独立粒子 Schrödinger 方程式 | 8         |
| 12.2 Bloch の定理と電子のバンド              | 10        |
| 12.3 ほとんど自由な電子の近似                  | 12        |
| 12.4 形状因子と構造因子                     | 14        |
| 12.5 近似的原子型ポテンシャル                  | 17        |
| 12.6 経験的擬ポテンシャル法 (EPM)             | 18        |
| 12.7 電子密度の計算：グリッドの導入               | 21        |
| 12.8 実空間での計算法                      | 24        |
| <b>第13章 平面波とグリッド：本格的な計算</b>        | <b>31</b> |
| 13.1 「非経験的」擬ポテンシャル法                | 32        |
| 13.2 射影演算子補強波 (PAW) 法              | 37        |
| 13.3 単結晶：構造, バンド, ...              | 39        |
| 13.4 超単位胞：表面, 界面, フォノン, 欠陥         | 47        |
| 13.5 クラスタと分子                       | 52        |
| <b>第14章 局在軌道：強束縛法</b>              | <b>57</b> |
| 14.1 局在原子中心軌道                      | 58        |
| 14.2 原子軌道に関する行列要素                  | 60        |
| 14.3 Slater-Koster の 2 中心近似        | 65        |
| 14.4 強束縛バンド：実例                     | 67        |
| 14.5 正方格子と CuO <sub>2</sub> 面      | 71        |
| 14.6 バンドの具体例：半導体と遷移金属              | 73        |

|             |                                     |            |
|-------------|-------------------------------------|------------|
| 14.7        | ナノチューブの電子状態                         | 74         |
| 14.8        | 強束縛法における全エネルギー, 力, 応力               | 80         |
| 14.9        | 転用性: 非直交性と環境依存性                     | 84         |
| <b>第15章</b> | <b>局在軌道: 本格的な計算</b>                 | <b>91</b>  |
| 15.1        | 局在基底を使った Kohn-Sham 方程式の解            | 91         |
| 15.2        | 解析的基底関数: Gauss 関数                   | 94         |
| 15.3        | Gauss 関数法: 基底状態と励起エネルギー             | 96         |
| 15.4        | 数値軌道                                | 100        |
| 15.5        | 局在軌道: 全エネルギー, 力, 応力                 | 103        |
| 15.6        | 数値局在軌道の応用                           | 106        |
| 15.7        | Green 関数法                           | 108        |
| 15.8        | 混合基底                                | 108        |
| 15.9        | 訳者付録: 局在基底による力の計算—Pulay 補正          | 109        |
| <b>第16章</b> | <b>補強された関数: APW, KKR, MTO</b>       | <b>115</b> |
| 16.1        | 補強された平面波 (APW) と「マフィンティン」           | 115        |
| 16.2        | APW 方程式を解く: いくつかの例                  | 121        |
| 16.3        | KKR または多重散乱理論 (MST) 法               | 129        |
| 16.4        | 合金とコヒーレントポテンシャル近似 (CPA)             | 137        |
| 16.5        | マフィンティン軌道 (MTO)                     | 140        |
| 16.6        | カノニカルバンド                            | 142        |
| 16.7        | 局在した「強束縛」MTO と KKR の定式化             | 150        |
| 16.8        | 補強法における全エネルギー, 力, 圧力                | 153        |
| <b>第17章</b> | <b>補強された関数: 線形法</b>                 | <b>159</b> |
| 17.1        | 波動関数のエネルギー微分: $\psi$ と $\dot{\psi}$ | 161        |
| 17.2        | 線形化された方程式の一般形                       | 164        |
| 17.3        | 線形補強平面波 (LAPW)                      | 166        |
| 17.4        | LAPW 法の応用例                          | 168        |
| 17.5        | 線形マフィンティン軌道 (LMTO) 法                | 173        |
| 17.6        | 「非経験的」強束縛法                          | 178        |
| 17.7        | LMTO 法の応用                           | 179        |
| 17.8        | 線形法を超えて: NMTO                       | 183        |
| 17.9        | 補強法におけるフルポテンシャル                     | 187        |
| 17.10       | 訳者付録: LMTO 法と NMTO 法の補足             | 188        |

|              |                                    |            |
|--------------|------------------------------------|------------|
| <b>第 V 部</b> | <b>電子状態からの物性予測—最近の発展</b>           | <b>197</b> |
| <b>第18章</b>  | <b>量子分子動力学 (QMD)</b>               | <b>199</b> |
| 18.1         | 分子動力学 (MD): 電子から受ける力               | 200        |
| 18.2         | 電子とイオンに対する Car-Parrinello 統一アルゴリズム | 201        |
| 18.3         | 平面波を使った表式                          | 207        |
| 18.4         | 密度汎関数 QMD への異なった方法                 | 209        |
| 18.5         | 自己無撞着ではない QMD 法                    | 210        |
| 18.6         | シミュレーションの例                         | 211        |
| <b>第19章</b>  | <b>応答関数: フォノン, マグノンなど</b>          | <b>221</b> |
| 19.1         | 電子状態論から見た格子動力学                     | 222        |
| 19.2         | 直接的な方法: 「凍結フォノン」, マグノン, ...        | 225        |
| 19.3         | フォノンと密度応答関数                        | 230        |
| 19.4         | Green 関数による定式化                     | 232        |
| 19.5         | 変分的表式                              | 234        |
| 19.6         | 周期的摂動とフォノンの分散曲線                    | 237        |
| 19.7         | 誘電応答関数, 有効電荷, ...                  | 238        |
| 19.8         | 電子-フォノン相互作用と超伝導                    | 241        |
| 19.9         | マグノンとスピン応答関数                       | 243        |
| <b>第20章</b>  | <b>励起スペクトルと光学的性質</b>               | <b>247</b> |
| 20.1         | 相互作用のない粒子の誘電応答                     | 248        |
| 20.2         | 時間依存密度汎関数論と線形応答                    | 249        |
| 20.3         | 動的線形応答に対する変分的 Green 関数法            | 254        |
| 20.4         | 陽に表示された実時間計算                       | 255        |
| 20.5         | 断熱的局所近似を超えて                        | 260        |
| 20.6         | 訳者付録: (20.10) 式の導出と分子の光吸収スペクトル     | 261        |
| <b>第21章</b>  | <b>Wannier 関数</b>                  | <b>267</b> |
| 21.1         | 定義と特性                              | 267        |
| 21.2         | 「最大射影」Wannier 関数                   | 271        |
| 21.3         | 最局在 Wannier 関数                     | 275        |
| 21.4         | 非直交局在関数                            | 281        |
| 21.5         | 「もつれたバンド」での Wannier 関数             | 283        |
| <b>第22章</b>  | <b>分極, 局在, Berry 位相</b>            | <b>289</b> |
| 22.1         | 分極: 根本的な難しさ                        | 292        |
| 22.2         | 分極の幾何学的 Berry 位相理論                 | 296        |
| 22.3         | Wannier 関数の中心との関係                  | 299        |
| 22.4         | 結晶における分極の計算                        | 300        |

|             |   |            |            |                              |            |
|-------------|---|------------|------------|------------------------------|------------|
| 22.5        | 局在：厳密な測度                                | 302        | 付録G        | 電子状態からの応力                    | 389        |
| 22.6        | スピン波の幾何学的 Berry 位相理論                    | 305        | G.1        | 巨視的な応力とひずみ                   | 389        |
| <b>第23章</b> | <b>局在性と線形スケーリング <math>O(N)</math> 法</b> | <b>309</b> | G.2        | 2 体中心力による応力                  | 393        |
| 23.1        | 多粒子量子系における局在性と線形スケーリング                  | 311        | G.3        | Fourier 成分による表式              | 393        |
| 23.2        | ハミルトニアン作成                               | 315        | G.4        | 内部ひずみ                        | 395        |
| 23.3        | 解法：非変分的方法                               | 316        | <b>付録H</b> | <b>エネルギー密度と応力密度</b>          | <b>399</b> |
| 23.4        | 変分的密度行列法                                | 327        | H.1        | エネルギー密度                      | 401        |
| 23.5        | 変分的（一般化された）Wannier 関数法                  | 331        | H.2        | 応力密度                         | 405        |
| 23.6        | 線形スケーリング自己無撞着密度汎関数計算                    | 335        | H.3        | 応用                           | 406        |
| 23.7        | 大規模な基底の集合での因数分解された密度行列                  | 338        | <b>付録I</b> | <b>力のもう1つの表式</b>             | <b>411</b> |
| 23.8        | さまざまな方法の組み合わせ                           | 339        | I.1        | 変分の自由度と力                     | 412        |
| 23.9        | 訳者付録：密度行列の多項式展開における演算量                  | 340        | I.2        | エネルギー差                       | 415        |
| <b>第24章</b> | <b>さらなる情報</b>                           | <b>343</b> | I.3        | 圧力                           | 415        |
| <b>付録C</b>  | <b>断熱近似</b>                             | <b>345</b> | I.4        | 力と応力                         | 417        |
| C.1         | 一般的定式化                                  | 345        | I.5        | APW 型計算法における力                | 418        |
| C.2         | 電子-フォノン相互作用                             | 347        | <b>付録L</b> | <b>数値計算法</b>                 | <b>421</b> |
| <b>付録D</b>  | <b>応答関数と Green 関数</b>                   | <b>349</b> | L.1        | 数値積分と Numerov 法              | 421        |
| D.1         | 静的応答関数                                  | 349        | L.2        | 最急降下法                        | 423        |
| D.2         | 自己無撞着場理論での応答関数                          | 351        | L.3        | 共役勾配法                        | 424        |
| D.3         | 動的応答と Kramers-Kronig の関係式               | 352        | L.4        | 準 Newton-Raphson 法           | 426        |
| D.4         | Green 関数                                | 355        | L.5        | Pulay の DIIS 法               | 427        |
| <b>付録E</b>  | <b>誘電関数と光学的性質</b>                       | <b>359</b> | L.6        | Broyden の Jacobi 行列更新法       | 428        |
| E.1         | 物質中の電磁波                                 | 359        | L.7        | モーメント法, 最大エントロピー法, ランダムベクトル法 | 430        |
| E.2         | 伝導度テンソルと誘電率テンソル                         | 361        | <b>付録M</b> | <b>電子状態の反復計算法</b>            | <b>435</b> |
| E.3         | $f$ 総和則                                 | 362        | M.1        | なぜ反復法を使う?                    | 436        |
| E.4         | スカラー縦誘電関数                               | 363        | M.2        | 簡単な緩和アルゴリズム                  | 437        |
| E.5         | テンソル横誘電関数                               | 364        | M.3        | 前処理                          | 438        |
| E.6         | 誘電応答への格子の寄与                             | 365        | M.4        | 反復法での (Krylov の) 部分空間        | 440        |
| <b>付録F</b>  | <b>無限大の系での Coulomb 相互作用</b>             | <b>369</b> | M.5        | Lanczos アルゴリズムとリカージョン法       | 441        |
| F.1         | 基本事項                                    | 369        | M.6        | Davidson アルゴリズム              | 443        |
| F.2         | 背景中の点電荷: Ewald 和                        | 371        | M.7        | 部分空間での残差最小化法—RMM-DIIS        | 444        |
| F.3         | 広がりを持つ核あるいはイオン                          | 377        | M.8        | エネルギー汎関数の最小化による解             | 445        |
| F.4         | 中性原子を基準にしたエネルギー                         | 379        | M.9        | 方法の比較と組み合わせ—残差またはエネルギーの最小化   | 450        |
| F.5         | 表面および界面の双極子                             | 380        | M.10       | 虚時間での指数関数による射影               | 451        |
| F.6         | 人為的映像電荷効果の削除                            | 382        | M.11       | アルゴリズムの複雑さ: 変換と疎行列ハミルトニアン    | 451        |

|                                 |            |
|---------------------------------|------------|
| <b>付録N 経験的擬ポテンシャルと強束縛法のコード</b>  | <b>459</b> |
| N.1 固有状態の計算：すべての方法に共通のモジュール     | 459        |
| N.2 平面波を使った経験的擬ポテンシャル法 (EPM)    | 460        |
| N.3 Slater-Koster 強束縛 (TB) 法    | 461        |
| N.4 TBPW 用の入力ファイルのサンプル          | 461        |
| N.5 2 中心行列要素：任意の各運動量 $l$ に対する表式 | 463        |
| <b>下巻の参考文献</b>                  | <b>467</b> |
| <b>訳者あとがき</b>                   | <b>495</b> |
| <b>索引</b>                       | <b>497</b> |