

第一原理シミュレーション技法(石川・佐藤健)

A2ターム月曜日2限

- クーロン相互作用や量子力学の基本法則、電子および原子核の属性のみを与えられたものとして、実験結果から得られる経験パラメーターを導入せずに物質(原子・分子・固体等の多粒子系)の多様な物性(全エネルギー、励起エネルギー、化学反応の活性化エネルギー、誘電率、ヤング率...)の解明を目指す計算を「第一原理計算」「第一原理シミュレーション」と呼びます。その基礎を、多体量子システムの重要な概念をまじえながら、講義します。

日付	担当教員	主な内容(予定)
11/30, 12/7, 12/14	石川	● 多粒子系のシュレーディンガー方程式 ● 同一種類の粒子(フェルミ粒子、ボース粒子) ● ハートリー・フォック法とその拡張 ● 密度行列、電子相関 ● 密度汎関数理論
12/21, 1/4, 1/7 (1/18は予備日)	佐藤健	

成績評価:出席状況、レポート(演習課題)に基づいて行う(期末試験は実施しない)

講義ノート:ITC-LMS および <http://ishiken.free.fr/english/lecture.html>(随時更新)

参考書:ザボ&オストランド「新しい量子化学(上・下)」、中嶋隆人「量子化学」、J.J.サクライ「現代の量子力学(下)」(5,6章)、マッカーリ&サイモン「物理化学(上)」、小出昭一郎「量子力学II」(9章)、原島鮮「初等量子力学」(18章)、ガシオロウィッツ「量子力学II」(18~20章)