

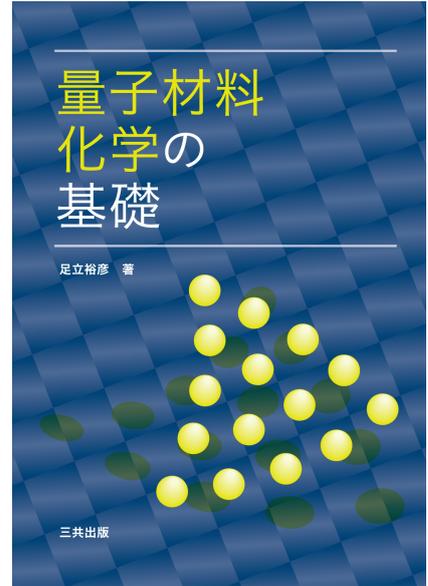
量子材料化学の基礎

京都大学名誉教授 足立裕彦 著

本書は物質・材料学の観点から量子力学の基礎理論を身につけ、原子・分子・固体を研究するのに必要な原子構造論や分子軌道論を理解し、どのような議論ができるかを学ぶことを目的とする。

現代の科学・技術は材料科学・技術のもとに成り立っているといっても過言ではない。先端的な技術においては、新しい観点に基づいた手法が求められる。また、近年のコンピューター技術の進歩により、量子力学計算のソフト開発が進み、実際の物質・材料の量子力学計算が以前よりずっと身近なものになっており、それらを駆使した計算技術を有効に利用することが必要である。

B5・316頁
本体 3,500円+税
ISBN 978-4-7827-0766-1



量子化学の基礎理論と原子構造論や分子軌道論を理解して新しい材料学発展の理論手法を開発する

目次

1. 序論
2. 波動力学
3. 水素原子の波動力学
4. 多電子原子の原子軌道
5. 分子軌道論
6. 簡単な分子の分子軌道
7. オキソアニンの分子軌道
8. 遷移金属錯体の電子状態と化学結合
9. 金属化合物の電子状態と化学結合
10. 分子と電磁波との相互作用

各章に、基礎的・補足的資料を「付録」としてまとめた

★DV-X α ならこちら★

改訂

【新版 はじめての電子状態計算】

- 1 電子状態計算とは
- 2 必要な計算環境の構成
- 3 DV-X α 分子軌道計算の基本操作
- 4 各種プログラムの解説
- 5 クラスタ法による結晶の計算
- 6 DV-X α 法のための統合支援環境
- 7 いろいろな計算
- 8 付録
 - A 分子の対称性
 - B 相対論 DV-X α 法
 - C 非相対論版 DVME法
 - D 入出力ファイルの補足説明
 - E 原子単位系について
 - F 収束に関するパラメータ

9月刊行

内容見本

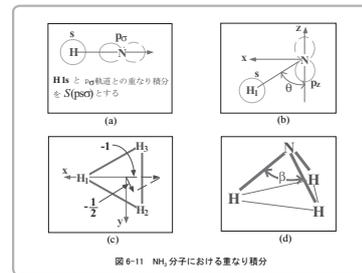


図 6-11 NH₃分子における重なり積分

$$S_{a_1} = \int \chi_a \chi_b d\tau = S(\text{ps}\sigma) \cos \theta \quad (6-12)$$

となる (図 (b) 参照)。そして 3 つの H 原子は N 原子から見て等価な位置にあるので、a₁ ブロックでの重なり積分は

$$S_{a_1} = \int \chi_a \frac{1}{\sqrt{3}} (\chi_{b_1} + \chi_{b_2} + \chi_{b_3}) d\tau = \sqrt{3} S(\text{ps}\sigma) \cos \theta \quad (6-13)$$

である。

次に e_g ブロックについて考えてみる。まず p_z 軌道と H 1s との重なり積分は

$$S_{e_g} = \int \chi_a \chi_b d\tau = S(\text{ps}\sigma) \sin \theta \quad (6-14)$$

である (図 (b) 参照)。また p_z 軌道の H_z および H_x 原子方向の成分は (-1/2) sin θ なので

$$S_{e_g} = \int \chi_a \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \left(\chi_{b_1} - \frac{1}{2} \chi_{b_2} - \frac{1}{2} \chi_{b_3} \right) d\tau = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \left(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) S(\text{ps}\sigma) \sin \theta = \frac{\sqrt{3}}{2} S(\text{ps}\sigma) \sin \theta \quad (6-15)$$

となる (図 (c) 参照)。同様に e_g ブロックでの重なり積分は

$$S_{e_g} = \int \chi_a \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{b_1} - \chi_{b_2}) d\tau = \frac{\sqrt{3}}{2} S(\text{ps}\sigma) \sin \theta \quad (6-16)$$

あなたも量子力学の理論と計算手法を駆使できる材料研究者へ

本書の理論を実際の計算を通してより深く理解するために



【計算実習編】電子書籍