

新版 はじめての電子状態計算

—DV-X α 分子軌道計算への入門—

京都大学名誉教授 足立裕彦・関西学院大学教授 小笠原一禎
兵庫教育大学教授 小和田善之・岡山理科大学准教授 坂根弦太
大阪大学准教授 水野正隆 共著

Windows
Mac
Linux 対応



改訂
しました

わかりやすい丁寧な解説と CD-ROM 付で DV-X α プログラムがパソコン上で簡単にできるということで評価いただいてきましたが、初版刊行以来約 20 年間にわたり開発・改良を重ねたプログラムをぜひ多くの皆様にご利用頂きたいと思えます。(著者より)

DV-X α 法は X α ポテンシャルを用いることにより計算時間が短く、数値関数を用いて周期表のすべての元素を同じ精度で計算ができます。さらにスレーターの遷移状態法を用いることで電子遷移のエネルギーや遷移確率を正確に求めることが可能で、ほかの手法に対して大きなアドバンテージを持っています。

本書は分子軌道法の概要からコンピュータに対応したプログラム使用法、さらに入力データの作成法や様々な計算例を示しながら具体的に解説します。

B5・284 頁
定価 3,240 円 (本体 3,000 円)
ISBN 978-4-7827-0767-8

これさえあれば簡単に電子状態計算が始められます。

無料

プログラム内容

* 本書購入者

- ◆ DV-X α 分子軌道計算プログラム
- ◆ 光電子スペクトルおよびX線吸収スペクトル計算プログラム
- ◆ 秀丸エディタを使用したDV-X α 法のための統合支援環境
- ◆ 相対論DV-X α 法計算プログラム
- ◆ 非相対論DVME法計算プログラム

改善点

- Mac(CUI版)・Linux(CUI版)に対応させました。
- 波動関数や電子密度、静電ポテンシャルマップなどをVESTAで3次元可視化して表示できます。
- 周期表の全ての元素に対応
- 様々なスペクトルを簡単に計算できます。(光電子スペクトル・電子遷移スペクトルなど)

目次

1 電子状態計算とは

2 必要な計算環境の構成

OSとCPU／メモリ／ハードディスク(RAM)／VESTAおよび秀丸エディタ／その他

3 DV-X α 分子軌道計算の基本操作

プログラムのインストール／入力ファイルの作成とプログラムの動かし方／計算結果の基本的な見方(1)／計算結果の基本的な見方(2)／Macintoshのインストール／Macintosh上での計算手順
Linuxマシンで計算を行う

4 各種プログラムの解説

GUI版DV-X α 周辺プログラム／光電子スペクトル計算プログラムPES／X線スペクトルの理論計算プログラムSXS

8 付録

分子の対称性／相対論DV-X α 法／非相対論版DVME法／入出力ファイルの補足説明／原子単位系について／収束に関するパラメータ

5 クラスタ法による結晶の計算

単位格子の作成／CIFを利用する／クラスタモデルを作成する／配位状態を考慮したクラスタモデルを作成する／原子空孔のモデルの作成方法／画面上のモデルの色々な表示方法

6 DV-X α 法のための統合支援環境

プログラムのダウンロードとインストール／統合支援環境の使い方／授業での統合支援環境の利用

7 いろいろな計算

水素吸蔵合金TiFe／ペロブスカイト型酸化物BaTiO₃／酸化インジウム(In₂O₃)中の酸素空孔／MgO表面、MgO/V界面／スピン分極を考慮に入れた計算(Fe)／窒素分子の反磁性、酸素分子の常磁性