

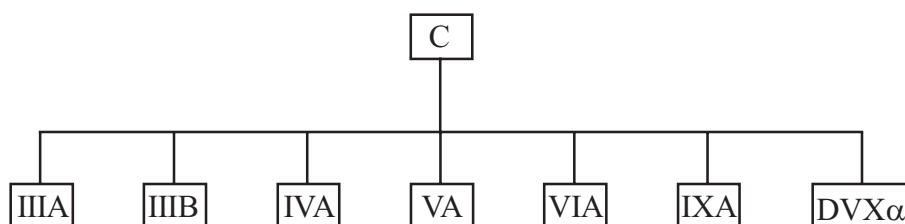
はじめに

量子材料化学では理論的な知識も重要であるが、最近の計算科学の発展により、自らの研究に計算を取り入れることも可能になっている。本書では主に DV-X α 分子軌道法を用いている。いろいろな物質の電子状態計算の実習を行う。量子力学の理論では、いろいろな波動方程式や波動関数が説明され、それを図で表されていることも多い。通常その数式や図を見て理解することで済むことが多く、読者自身が計算をして図を描いて確かめることまではしない。しかし量子力学の基礎的な理解を深めるには、できるだけ自分の手で計算し結果を図にしたりして、理論を確認することが役に立つと思う。この計算実習では、電子状態計算やその周辺の理論を理解するのに役立つと思われる計算プログラムをいくつか用意した。

ここで公開したプログラムはほとんどすべて筆者が作成したもので、ソース・プログラムはフォートラン言語で書かれている。プログラムは不十分で不備な点も多いので、フォートランを習得された読者が、修正あるいは変更してより良いプログラムに改良することは可能である。ただしその際は、読者が責任を持っていただきたい。

実際の計算のプラットフォームは WINDOWS のコマンドプロンプトで実行するよう書かれている。最近ではアイコンをクリックするだけでプログラムを実行することが多いので、コマンドプロンプトに慣れていない場合は、面倒であるが最初にその簡単な使い方を覚える必要がある。よく使うコマンドの簡単な説明は最後にメモとして記しておく。また別のコンピューターの OS で計算したい場合は、それなりの変更をすれば可能であると思われる。計算結果は数値で出力される場合が多い。DV-X α 計算の場合は、結果を処理して作図する付属ソフトが用意してあるが、他の計算ではそこまで整備していないので、読者自身で処理していただきたい。筆者はマイクロソフト・エクセルなどで簡単に表にしたり描画したりしているが、他のソフトを使ってよりきれいに表示することも可能である。

つぎに本書で行う計算実習の標準的なやり方を述べる。計算実習の各項目にはフォルダー（ディレクトリ）が用意されている。これらのフォルダーを PC の C ドライブの中に置く。すなわち C ドライブの下に次の構造を作る。



計算実習 IIIA ではプログラム : Numerov, IIIB: Nonhydrog & Relhydrog, IVA: ATOMXA, VA: Nigens, VIA: OIA, IXA: MADELG, を用いる。また IVB では ATOMXA を使い, VIB, VIIA, VIIB, VIIIA, VIIBB, IXB, IXC, XA, XB, XC は DV- $X\alpha$ プログラムを使用する。各項目 (フォルダー) には必要なプログラム (ソース・プログラムおよび実行プログラムなど), 入力データ例, 説明書が用意されている。コマンドプロンプトを開いて, 計算実習のディレクトリに入って作業を行う (メモ参照)。

「計算実習編」全般的に DV- $X\alpha$ 計算以外については, 計算ソフトが完成されたものではなく不備な点も多いので, 実際の作業を行うには, もう少し詳細な説明が必要と思われる。そこで各項目についてフォルダー内に補足説明あるいは注意書きを加えておいた。筆者としては将来的に読者とコミュニケーションをとりながら, 計算ソフトの不備な点の修正や補足説明・注意書きの加筆などして改訂できるようにしておきたい。

計算実習の後半では, いろいろな物質の電子状態を DV- $X\alpha$ 法で計算する。DV- $X\alpha$ 法の計算手法は『初めての電子状態計算』に詳しく書かれており, 本書のプログラムは基本的に同じものである。また『初めての電子状態計算』の改訂版の出版が予定されており, より便利に使えるようになっているので, そちらも参考にしていきたい。

2017年2月

著者

メモ

コマンドプロンプトでよく使用する コマンド/省略形 (ディレクトリ xxx 内での作業)	
1. chdir/cd : カレントディレクトリ # を変更する	
例 1. yyy ディレクトリに変更する	C:\Yxxx>cd Yyyy
例 2. ディレクトリを1つ上の階層に変更する	C:\Yxxx>cd ..
2. mkdir/md : ディレクトリを作成する	
例 yyy ディレクトリを新規作成する	C:\Yxxx>mkdir yyy
3. rmdir/rd : ディレクトリを削除する	
例 xxx ディレクトリを強制的に削除する	C:\Y>rmdir /s Yxxx
4. copy : ファイルをコピーする	
例 yyy を zzz にコピー	C:\Yxxx>copy yyy zzz
5. dir : ファイルを一覧表示する	
例 カレントディレクトリのファイルを一覧表示	C:\Yxxx>dir
6. del/erase : ファイルを削除する	
例 ファイル yyy を削除	C:\Yxxx>del yyy
7. rename/ren : ファイル名を変更する	
例 テキストファイルを一括変更する	C:\Yxxx>rename *.txt *.xls
8. type : ファイルの内容を表示する	
例 yyy の内容を画面に表示	C:\Y>type yyy

ディレクトリ=フォルダ (コマンドプロンプトではディレクトリと呼ぶ)

計算実習編 (Windows 対応ソフト付)

目 次

III A	動径波動方程式の数値計算 (Numerov 法)	1
III B	水素様原子の動径波動関数	8
IV A	原子構造計算プログラム “ATOMXA”	13
IV B	原子核近傍での電子構造計算	20
VA	2 原子分子の永年方程式	28
VIA	原子軌道間の重なり積分の評価 “プログラム OIA” の説明	29
VIB	DV-X α 計算 CO 分子	35
VII A	DV-X α 計算 NO ₃ ⁻ イオン	40
VII B	DV-X α 計算 ClO ₄ ⁻ と MnO ₄ ⁻ イオン	45
VIII A	DV-X α 計算 [Fe(CN) ₆] ³⁻ 錯体	49
VIII B	DV-X α 計算 Ti ₂ クラスターのスピン状態	52
IX A	マーデルング場の計算	55
IX B	DV-X α 計算 MgO クラスター	67
IX C	DV-X α 計算 Fe 酸化物	72
XA	DV-X α 計算 オキソアニオンの L _{2,3} 蛍光 X 線スペクトル	78
XB	DV-X α 計算 SF ₆ の X 線吸収スペクトル	84
XC	DV-X α 計算 CO 分子の X 線光電子スペクトル	89
	索引	99

DV-X α , III A, III B, IV A, VA, VIA, IX A

ソフトには、上記項目が入っています。