

978-4-7827-0766-1

B5・並製・320頁
本体3,500円＋税

量子材料化学の基礎

京都大学名誉教授 足立裕彦 著

現代の科学・技術は新しい材料開発がカギを握っていることが多く、その開発・研究には新しい観点に基づいた手法が求められている。本書では物質・材料学の観点から量子力学の理論を理解し、原子・分子・固体研究に必要な原子構造論や、分子軌道論を理解する。

目次

序 論／波動力学／水素原子の波動力学／多電子原子の原子軌道／分子軌道論／簡単な分子の分子軌道／オキソアニオンの分子軌道／遷移金属錯体の電子状態と化学結合／金属化合物の電子状態と化学結合／分子と電磁波との相互作用

電子書籍

計算実習編 (Windows対応ソフト付)

本体2,000円＋税

DLマーケットで販売中。詳しくは裏面をご覧ください。

978-4-7827-0767-8

B5・並製・224頁
本体3,000円＋税

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

1998年に刊行した「はじめての電子状態計算」は、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好評を博してきたが、今回、進化する量子化学に合わせて本文を全面的に改訂し、プログラムもリニューアルした。さらにプログラムは本書記載のアカウントよりダウンロードできるようになり、より使いやすくなっている。詳しい内容はHPをご覧ください。

◆プログラムの内容

*DV-X α 分子軌道計算プログラム

- ・Windows PC (GUI版)
- ・Macintosh (CUI版)
- ・Linux (CUI版)

*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



計算実習編 (Windows 対応ソフト付) は DL マーケットで販売しています。
ソフトには下記の項目が入っています。本編と併せてご使用下さい。



DV-X α , IIIA, IIIB, IVA, VA, VIA, IXA

定価(本体 2,000 円) + 税

量子材料化学の基礎-計算実習編 (Windows 対応ソフト付)

京都大学名誉教授 足立裕彦 著

目 次

- IIIA 動径波動方程式の数値計算 (Numerov 法)
- IIIB 水素様原子の動径波動関数

- IVA 原子構造計算プログラム “ATOMXA”
- IVB 原子核近傍での電子構造計算

- VA 2 原子分子の永年方程式

- VIA 原子軌道間の重なり積分の評価 “プログラム OIA” の説明
- VIB DV-X α 計算 CO 分子

- VIIA DV-X α 計算 NO $_3^-$ イオン
- VII B DV-X α 計算 ClO $_4^-$ と MnO $_4^-$ イオン

- VIIIA DV-X α 計算 [Fe(CN) $_6$] $^{3-}$ 錯体
- VII B DV-X α 計算 Ti $_2$ クラスターのスピン状態

- IXA マーデルング場の計算
- IXB DV-X α 計算 MgO クラスタ
- IXC DV-X α 計算 Fe 酸化物

- 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
- XB DV-X α 計算 SF $_6$ の X 線吸収スペクトル
- XC DV-X α 計算 CO 分子の X 線光電子スペクトル