

# 目 次

プログラム利用者へのお願い .....	xii
---------------------	-----

## 1 電子状態計算とは

---

1-1 はじめに .....	1
1-2 電子状態計算 .....	1
1-3 分子軌道法 .....	2
1-3-1 LCAO 法 .....	4
1-3-2 分子軌道法の求め方 .....	5
1-4 DV- $X\alpha$ 法 .....	7
1-5 マリケンの電子密度解析 .....	9

## 2 必要な計算環境の構成

---

2-1 OS と CPU .....	12
2-2 メモリ (RAM) .....	12
2-3 ハードディスク .....	12
2-4 VESTA および秀丸エディタ .....	13
2-5 その他 .....	13

## 3 DV- $X\alpha$ 分子軌道計算の基本操作

---

3-1 プログラムのインストール .....	14
3-1-1 プログラムの起動と動作確認 .....	14
3-2 入力ファイルの作成とプログラムの動かし方 .....	15
3-2-1 入力ファイル F01 の作成 .....	15
3-2-2 MAKEF05 の実行 .....	16
3-2-3 分子軌道計算の実行と収束状況の確認 .....	17
3-2-4 複数の計算を行う場合 .....	19
3-3 計算結果の基本的な見方 (1) .....	20
3-3-1 有効電荷と有効共有結合電荷 .....	20

3-3-2	エネルギー準位	21
3-3-3	エネルギー準位図の作成	22
3-3-4	Overlap Population Diagram の作成	24
3-3-5	波動関数の作図	27
3-4	計算結果の基本的な見方 (2)	30
3-4-1	LiF および N <sub>2</sub> 分子	30
3-4-2	H <sub>2</sub> O 分子	33
3-5	Macintosh のインストール	39
3-5-1	MacOSX へのインストールの準備	39
3-5-2	インストールの手順	43
3-6	Macintosh 上での計算手順	44
3-6-1	Vi エディタの使用法	44
3-6-2	計算の流れ	45
3-6-3	分子軌道計算の準備	47
3-6-4	DV-X $\alpha$ 分子軌道計算の基本操作	47
3-7	Linux マシンで計算を行う	60

## 4 各種プログラムの解説

---

4-1	GUI 版 DV-X $\alpha$ 周辺プログラム	61
4-1-1	Structure	61
4-1-2	LVLSHM	63
4-1-3	DOS	66
4-1-4	LVLBNDS	69
4-1-5	CONTR	71
4-2	光電子スペクトル計算プログラム PES	76
4-2-1	原子の光イオン化過程	76
4-2-2	CO 分子の X 線光電子プログラムの計算	77
4-3	X 線スペクトルの理論計算—プログラム “SXS”	89
4-3-1	理論の概論	89
4-3-2	SXS 計算の例 SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> クラスターの L <sub>2,3</sub> 蛍光 X 線スペクトルの計算	90
4-3-3	SF <sub>6</sub> の X 線吸収スペクトルの計算	98

## 5 クラスター法による結晶の計算

---

5-1	単体格子の作成	106
5-2	CIF (Crystallographic Information File) を利用する	107
5-3	クラスターモデルを作成する	109
5-4	配位状態を考慮したクラスターモデルを作成する	114
5-5	原子空孔のモデルの作成方法	116
5-6	画面上のモデルの色々な表示方法	118

## 6 DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境

---

6-1	DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境	120
6-2	プログラムのダウンロードとインストール	121
6-2-1	秀丸エディタのインストール	122
6-2-2	DV- $X\alpha$ 法プログラム一式のインストール	122
6-2-3	eduDV のインストール	123
6-2-4	DV- $X\alpha$ 法計算支援環境 (秀丸エディタマクロ) のインストール	123
6-2-5	VESTA のインストール	125
6-2-6	OpenBabel のインストール	125
6-2-7	DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境の動作確認	125
6-3	統合支援環境の使い方	132
6-3-1	f01 の準備	133
6-3-2	SCAT の実行	144
6-3-3	SCAT 計算結果の確認	144
6-3-4	波動関数の 3 次元可視化	148
6-3-5	対称軌道を用いた SCAT 計算	159
6-4	授業での統合支援環境の利用	173
6-4-1	内蔵構造データを利用する場合	174
6-4-2	原子番号, 原子間距離, 原子間角度, 酸化数を手入力する場合	174

## 7 いろいろな計算

---

7-1	水素吸蔵合金 TiFe	175
7-1-1	入力データの作成	176
7-1-2	計算が収束しにくい場合の対処方法	177

7-1-3	化学結合状態の解析	178
7-2	ペロブスカイト型酸化物 BaTiO <sub>3</sub> (正方晶)	180
7-2-1	入力データの作成	181
7-2-2	マーデルング・ポテンシャルの確認と最適化	182
7-2-3	化学結合状態の解析	184
7-3	酸化インジウム (In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) 中の酸素空孔	185
7-3-1	入力データの作成	185
7-3-2	酸素空孔の作成	186
7-3-3	化学結合状態の解析	189
7-4	MgO 表面, MgO/V 界面	192
7-4-1	表面・界面の入力データの作成方法	192
7-4-2	表目・界面におけるマーデルング・ポテンシャルの設定	195
7-4-3	化学結合状態の解析	196
7-5	スピン分極を考慮に入れた計算 (Fe)	198
7-5-1	スピン分極を考慮に入れた入力データの作成方法	198
7-5-2	化学結合状態の解析	200
7-6	窒素分子の反磁性, 酸素分子の常磁性	201

## 8 付 録

---

付録 A	分子の対称性	214
A-1	分子の対称性と点群	214
A-2	分子の対称性と重なり積分	215
付録 B	相対論 DV-X $\alpha$ 法	219
B-1	プログラムの準備	219
B-2	入力ファイルの作成	219
B-3	プログラムの実行	223
B-4	分子軌道のポピュレーション解析	229
B-5	エネルギー準位図の作成	233
B-6	状態密度図の作成	234
B-7	有効共有結合電荷	236
B-8	有効電荷	237
付録 C	非相対論版 DVME 法	238
C-1	プログラムのインストール	238
C-2	実行するプログラムとその順番	238

C-3	具体的な計算手順	238
付録 D	入出力ファイルの補足説明	252
D-1	scat の入出力ファイル一覧	252
D-2	入力ファイル F05 について	252
D-3	LVLSHM の入力ファイル L04 について	254
D-4	DOS の入力ファイル D04 について	255
D-5	LVLBND5 の入力ファイル LB4S および LB5S について	256
D-6	CONTR の入力ファイル C04 について	258
D-7	ポピュレーション解析の結果 BN8 および F08P について	258
D-7-1	対称軌道を用いた場合のポピュレーション解析	258
D-7-2	各分子軌道のポピュレーション解析	260
付録 E	原子単位系について	262
付録 F	収束に関するパラメータ	263
F-1	Mixing Parameter について	263
F-2	収束に関するファイル	263
F-2-1	F06ZP の内容	264
F-2-2	F06ZP の各パラメータの説明	265
F-3	いろいろな計算の収束状況	267
F-4	計算が収束しにくい場合の対処方法	268
参 考 書		269
索 引		270