

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- $X\alpha$ 計算 CO 分子	35
VII A	DV- $X\alpha$ 計算 NO_3^- イオン	40
VII B	DV- $X\alpha$ 計算 ClO_4^- と MnO_4^- イオン	45
VIII A	DV- $X\alpha$ 計算 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ 錯体	49
VIII B	DV- $X\alpha$ 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- $X\alpha$ 計算 MgO クラスタ	67
IX C	DV- $X\alpha$ 計算 Fe 酸化物	72
XA	DV- $X\alpha$ 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- $X\alpha$ 計算 SF_6 の X 線吸収スペクトル	84
XC	DV- $X\alpha$ 計算 CO 分子の X 線光電子スペクトル	89
	索引	99

DV- $X\alpha$, 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。