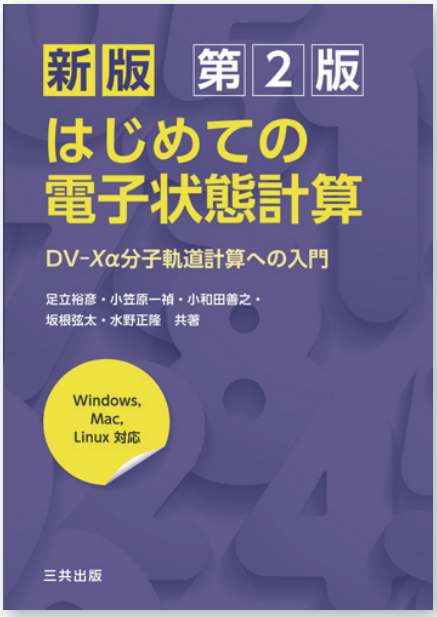
NEW

新 版 第 2 版

ISBN: 978-4-7827-0837-8
定価：3,850 円（税 10% 込）
9784782708378

はじめての 電子状態計算 — DV-Xα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
岡山理科大学教授 坂根 弦太　大阪大学准教授 水野 正隆　共著



B5 判・並製本・296 ページ

※ DV-Xα プログラムは，本書に記載の
ウェブサイトからダウンロードできます。

電子状態計算プログラム「DV-Xα」とその利用法を，わかりやすく・丁寧に解説

特徴

DV-Xα とは？

- **パソコンで簡単に電子状態を計算・表示**
  Windows, macOS, Linux* に対応　* Linux は CUI 版のみ
- **計算が速く，複雑な系も短時間で計算できる**
  経験的なパラメータを用いない第一原理計算法
- **全ての元素の物質で計算が可能**
  水素 $_{1}$H ～ オガネソン $_{118}$Og まで，同じ精度で計算
- **充実した周辺プログラム群**
  ポピュレーション解析，エネルギー準位図，状態密度図，電子遷移スペクトル図，Overlap Population Diagram，波動関数の等高線図，クラスター計算，他

NEW

第 2 版の主な改訂内容

- **「macOS」版で提供が開始された Windows 版と同等の計算支援環境**
- **追加された周辺プログラム UVS**
  可視・紫外吸収スペクトルの算出プログラム
- **フリーのプログラムを活用する方法**
  Avogadro を利用した分子モデルの構築，他

CONTENTS

1 電子状態計算とは
1-1 はじめに
1-2 電子状態計算
1-3 分子軌道法
1-4 DV-Xα 法
1-5 マリケンの電子密度解析

2 必要な計算環境の構成
2-1 OS と CPU
2-2 メモリ（RAM）
2-3 ハードディスク
2-4 VESTA および秀丸エディタ
2-5 その他

3 DV-Xα 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
3-2 入力ファイルの作成とプログラムの動かし方
3-3 計算結果の基本的な見方（1）
3-3-1 有効電荷と有効共有結合電荷
3-3-2 エネルギー準位
3-3-3 エネルギー準位図の作成
3-3-4 Overlap Population Diagram の作成
3-3-5 波動関数の作図
3-4 計算結果の基本的な見方（2）
3-4-1 LiF および N_2 分子
3-4-2 H_2O 分子
3-5 Macintosh のインストール
3-6 Macintosh 上での計算手順
3-7 Linux マシンで計算を行う

4 各種プログラムの解説
4-1 GUI 版 DV-Xα 周辺プログラム
4-2 光電子スペクトル計算プログラム PES
4-3 X 線スペクトルの理論計算―プログラム “SXS”
4-4 可視・紫外吸収スペクトルの理論解析―プログラム“UVS” NEW

5 クラスター法による結晶の計算
5-1 単位格子の作成
5-2 CIF（Crystallographic Information File）を利用する
5-3 クラスターモデルを作成する
5-4 配位状態を考慮したクラスターモデルを作成する
5-5 原子空孔のモデル作成方法
5-6 画面上のモデルの色々な表示方法

6 DV-Xα 法のための統合支援環境
6-1 DV-Xα 法のための統合支援環境
6-2 プログラムのダウンロードとインストール
6-3 統合支援環境の使い方
6-4 授業での統合支援環境の利用

7 Mac 用 DV-Xα 支援環境 NEW
7-1 Mac 用 DV-Xα 計算支援環境
7-2 計算支援環境のインストール
7-3 macOS の仕様変更に伴う作業と ghostscript のインストール
7-4 計算を行うための macOS の環境についての注意
7-5 計算環境の利用方法
7-6 計算の実例
7-6-1 CO 分子の計算
7-6-2 CO_2 分子の自動計算
7-6-3 Avogadro を利用した分子モデルの作成と分子軌道計算

8 いろいろな計算例
8-1 水素吸蔵合金 TiFe
8-2 ペロブスカイト型酸化物 $BaTiO_3$（正方晶）
8-3 酸化インジウム（In_2O_3）中の酸素空孔
8-4 MgO 表面，MgO/V 界面
8-5 スピン分極を考慮に入れた計算（Fe）
8-6 窒素分子の反磁性，酸素分子の常磁性

付録
付録 A 分子の対称性
付録 B 相対論 DV-Xα 法
付録 C 非相対論版 DVME 法
付録 D 入出力ファイルの補足説明
付録 E 原子単位系について
付録 F 収束に関するパラメータ

三共出版
東京都千代田区神田神保町 3-2
03-3264-5711
03-3265-5149（FAX）
https://www.sankyoshuppan.co.jp

書籍の詳細は
こちらをご覧ください