

目次

第 1 章	量子化学	1
1.1	量子化学の歴史	3
1.2	量子化学以前の理論化学の歴史	9
1.3	シュレーディンガー方程式の基礎となる解析力学	15
1.4	シュレーディンガー方程式	20
1.5	波動関数の解釈	22
1.6	分子の並進運動の量子化	25
1.7	分子の振動運動の量子化	28
1.8	分子の回転運動の量子化	31
1.9	電子運動の量子化：水素原子	35
第 2 章	ハートリー・フォック法	39
2.1	ハートリー法：複数電子をもつ系の電子状態計算法	41
2.2	分子軌道法：分子の電子状態の計算法	44
2.3	スレーター行列式：電子の交換を考慮した波動関数	48
2.4	ハートリー・フォック法：スレーター行列式にもとづく電子状態計算法	50
2.5	ローターン法：行列形式の SCF 法	54
2.6	基底関数	57
2.7	クーロン・交換相互作用と積分計算の高速化	61
2.8	非制限ハートリー・フォック法：開殻系の電子状態計算	64
2.9	原子の電子状態	67

第 3 章	電子相関	73	第 7 章	軌道エネルギー	183
3.1	電子相関：ハートリー・フォック法に足りない効果	75	7.1	クーブマンの定理：軌道エネルギーの意味	185
3.2	動的電子相関と静的電子相関	77	7.2	ヤナクの定理	187
3.3	電子配置間の相互作用	81	7.3	軌道エネルギーが再現できない理由	191
3.4	ブリュアン定理：1 電子励起の定理	84	7.4	軌道エネルギーにおける電子相関の効果	193
3.5	より効率的に高度な電子相関を取りこむ理論	85	7.5	最適化有効ポテンシャル法	195
第 4 章	コーン・シャム法	89	7.6	高精度な相関ポテンシャルの開発	197
4.1	トーマス・フェルミ理論：DFT の基本コンセプト	91	7.7	厳密運動・交換・相関ポテンシャルの直接決定	200
4.2	ホーエンベルグ・コーン定理：DFT の基本定理	93	7.8	固体バンド計算における補正	202
4.3	コーン・シャム法：DFT の計算理論	95	7.9	長距離補正 DFT による軌道エネルギーの再現	206
4.4	一般化コーン・シャム法：コーン・シャム法の拡張	99	付録 A	基礎物理条件	215
4.5	電子密度によるポテンシャルの直接決定	100	索引	240	
4.6	時間依存コーン・シャム法：励起スペクトルの計算法	104			
4.7	Coupled perturbed コーン・シャム法：応答物性の計算法	109			
第 5 章	交換・相関汎関数	115			
5.1	交換・相関汎関数の分類	117			
5.2	LDA・GGA 交換汎関数	120			
5.3	LDA・GGA 相関汎関数	124			
5.4	メタ GGA 汎関数	131			
5.5	混成汎関数	136			
5.6	半経験的汎関数	138			
5.7	交換・相関汎関数の妥当性	141			
第 6 章	汎関数に対する補正	143			
6.1	長距離補正	145			
6.2	自己相互作用補正	150			
6.3	ファンデルワールス (分散力) 補正	155			
6.4	相対論的補正	165			
6.5	ベクトルポテンシャル補正と電流密度	174			