

目 次

1章 量子化学計算で何ができるか？ …… 1	
1.1 シミュレーション手法の概観・特徴比較 ……2	1.2 量子化学計算でできること ……5
1.1.1 研究対象のスケールとシミュレーション手法の選択 ……2	1.3 量子化学計算の応用事例 ……9
1.1.2 化学系シミュレーション手法の特徴比較 ……4	1.4 おわりに ……13
	参考文献 ……13
2章 計算実行のための環境づくり …… 14	
2.1 量子化学計算ソフト ……14	2.3 支援計算ソフト ……25
2.1.1 Gaussian の概要・特徴 ……15	2.4 計算機・クラウド環境 ……27
2.1.2 その他の量子化学計算ソフトの概要・特徴 ……18	2.4.1 オンプレミス運用とクラウド運用 ……27
2.2 ビューアソフト ……21	2.4.2 岡崎スパコンの利用 ……29
2.2.1 GaussView の概要・特徴 ……23	2.5 計算時間と並列効率 ……30
2.2.2 その他のビューアソフトの概要・特徴 ……24	2.6 おわりに ……31
	参考文献 ……31
3章 計算手法と基底関数 …… 32	
3.1 とりあえずお勧めの方法を知りたい人へ ……32	3.3.3 密度汎関数理論 ……45
3.2 量子化学計算の簡単な理論的背景 ……33	3.4 基底関数 ……47
3.2.1 シュレーディンガー方程式 ……33	3.4.1 基本基底関数 ……48
3.2.2 シュレーディンガー方程式の近似 ……35	3.4.2 追加基底関数 ……49
3.2.3 計算手法と基底関数 ……36	3.4.3 有効内殻ポテンシャル ……51
3.3 計算手法 ……38	3.5 計算条件の選択 ……52
3.3.1 ハートリー-フォック法 ……39	3.5.1 DFT 汎関数の選択指針 ……52
3.3.2 電子相関と電子相関理論 ……43	3.5.2 基底関数の選択指針 ……54
	参考文献 ……55
4章 Gaussian の基本的な使い方 …… 56	
4.1 Gaussian と GaussView の基礎知識 ……56	4.4.2 分子構造構築時でのその他の便利な機能 ……66
4.2 Gaussian での計算の流れ ……56	4.4.3 入力ファイルの作成 ……68
4.3 Gaussian 入力ファイルの構成 ……57	4.5 テキストエディタによる入力ファイルの編集 ……69
4.3.1 Link 0 コマンド ……58	4.6 Gaussian ジョブの実行 ……70
4.3.2 ルートセクション ……60	4.6.1 GaussView からの実行 ……70
4.3.3 分子指定セクション ……60	4.6.2 UNIX/Linux での実行 ……71
4.4 GaussView による入力ファイルの作成 ……63	4.7 一般的な注意事項 ……72
4.4.1 一般的な分子構造の構築例 ……63	

4・7・1 入力ファイルのチェック	72	演習問題*	74
4・7・2 計算開始直後のチェック	73		
5章 構造最適化 ……75			
5・1 構造最適化とは	75	5・3 構造最適化のポイント	85
5・1・1 構造最適化の原理	75	5・3・1 初期構造について	85
5・1・2 初期構造選択の重要性	76	5・3・2 元素ごとに異なる基底関数を与える場合の構造最適化	87
5・1・3 極小点の確認：振動解析	76	5・3・3 構造最適化の進捗状況の確認	89
5・2 Gaussianによる構造最適化の手順	77	5・4 構造最適化の実例	90
5・2・1 入力ファイルの作成と出力ファイルの見方	77	演習問題*	91
5・2・2 部分構造最適化	81	参考文献	91
5・2・3 構造最適化後の振動解析	84		
6章 分子軌道 ……92			
6・1 分子軌道とは	92	6・3 Gaussianによる分子軌道計算の手順	100
6・1・1 原子価結合法と分子軌道法の違い	92	6・3・1 入力ファイルの作成と出力ファイルの見方	100
6・1・2 分子軌道の成り立ち	93	6・3・2 分子軌道の可視化	101
6・1・3 分子軌道間の相互作用	94	6・4 応用事例	102
6・2 HOMOとLUMOの性質と利用法	96	演習問題*	103
6・2・1 HOMOとLUMOの性質	96	参考文献	103
6・2・2 フロンティア軌道と反応性	98		
7章 基底状態の物性 ……104			
7・1 電荷分布	104	7・3・1 化学シフトの計算	114
7・1・1 Mulliken密度解析	104	7・3・2 NMR計算の応用例：NICS	117
7・1・2 自然密度解析	106	7・4 溶媒モデル	120
7・1・3 電荷分布、双極子モーメント、静電ポテンシャルの可視化	108	7・4・1 溶媒モデルの概要	120
7・2 IR・ラマンスペクトル	110	7・4・2 PCM法および関連の方法	120
7・2・1 調和近似	110	7・4・3 Gaussianでの溶媒効果の計算例	121
7・2・2 IRとラマンスペクトルの計算	111	演習問題*	123
7・3 NMRスペクトル	114	参考文献	124
8章 化学反応メカニズム ……125			
8・1 反応経路解析の基礎知識	126	8・3・2 QST2/QST3法	141
8・1・1 基本用語	126	8・4 遷移状態の妥当性評価	144
8・1・2 反応経路解析の一般的な手順	127	8・4・1 振動解析	144
8・2 反応経路の最適化	129	8・4・2 IRC解析	146
8・2・1 SCAN法	129	8・5 遷移状態構造最適化が上手くいかない時	152
8・2・2 NEB法	131	演習問題*	154
8・3 遷移状態の探索	139		
8・3・1 通常法	139		

9章 開殻系の取り扱い……156

9・1 開殻系とは	156	9・3 応用事例	168
9・1・1 閉殻系と開殻系	156	9・3・1 2価の銅の2核錯体の交換相互作用	168
9・1・2 制限法と非制限法	157	9・3・2 オリゴチオフェンラジカルカチオン π ダイマー	168
9・2 Gaussianによる計算の手順	158	演習問題*	171
9・2・1 二重項の計算	158	参考文献	171
9・2・2 三重項と開殻一重項の計算：SCF解の安定性	161		
9・2・3 初期軌道の組み換え	166		

10章 励起状態の物性……172

10・1 励起状態計算の基礎知識	172	10・2・3 基底関数の選択指針	180
10・1・1 励起状態とは？	172	10・3 Gaussian計算の手順・結果閲覧	181
10・1・2 電子状態・分子軌道・電子配置	173	10・3・1 1点計算	181
10・1・3 吸光・発光と分子構造の関係	174	10・3・2 構造最適化計算	186
10・2 励起状態の計算方法	175	10・3・3 Gaussian計算上の注意	188
10・2・1 励起状態計算手法の概観	175	演習問題*	190
10・2・2 TD-DFT法	178	参考文献	191

11章 計算を有効活用するためのヒント……192

11・1 計算の3つの有効活用法	192	11・2・1 計算対象のモデル化	198
11・1・1 想定した仮説の妥当性を計算によって検証する	193	11・2・2 「計算可能量」への落とし込み	201
11・1・2 計算結果から新たな仮説を立てる	194	11・2・3 計算結果の妥当性評価	202
11・1・3 実験の代わりとして計算する	196	11・3 実験と計算それぞれの利点を意識する	205
11・2 計算研究における3つのポイント	198	11・4 おわりに	206
		参考文献	207

索引……209

主な執筆担当(担当章順)

本田 康(1～3章、8章、10章、11章)

西長 亨(4～7章、9章)

* いくつかの章に演習問題を付したが、計算結果は使用ソフトのバージョンや計算機環境によって変わってくるため、解答は掲載していない。しかし下記サイトに、筆者らの環境で計算されたデータやファイルを掲載しているので、必要に応じて参照されたい。

URL <http://www.shokabo.co.jp/mybooks/ISBN978-4-7853-3523-6.htm>