

目次

第 1 章 電子状態の計算科学	1
1.1 序論	1
1.1.1 量子化学の基礎方程式	1
1.1.2 ボルン・オッペンハイマー近似	3
1.1.3 一電子原子の軌道	5
1.1.4 スピン	9
1.1.5 ヒルベルト空間, 関数空間	13
1.1.6 相対論的効果	16
1.2 基底関数展開	22
1.2.1 ハートリー・フォック近似	23
1.2.2 一電子描像の基底関数	26
1.2.3 多電子波動関数と電子間カスプ条件	28
1.2.4 電子相関のための基底関数	30
1.2.5 二電子反発積分の計算法	33
1.2.6 近似的計算法	38
1.3 結合クラスター理論および多体摂動論	43
1.3.1 配置間相互作用	44
1.3.2 結合クラスター理論	47
1.3.3 多体摂動論	51
1.3.4 多体スケールリング特性	54
1.3.5 応答理論と励起状態計算	58
1.3.6 電子間距離に依存する基底関数の導入	61

1.3.7	第二量子化	65
1.4	多参照理論	71
1.4.1	多配置波動関数と電子相関	72
1.4.2	多配置 SCF 法	74
1.4.3	多参照摂動法	80
1.4.4	多参照 CI 法	89
1.5	密度汎関数理論	95
1.5.1	基礎定理	96
1.5.2	汎関数の定義	98
1.5.3	汎関数の性質	103
1.5.4	摂動展開	108
1.5.5	汎関数の近似	117
第 2 章	分子運動の計算科学	123
2.1	分子動力学法の基礎	124
2.1.1	分子動力学法の種類	124
2.1.2	N 多体系の古典力学	127
2.1.3	分子動力学法の手順	130
2.1.4	境界条件	131
2.1.5	分子動力学法の基礎のまとめ	134
2.2	時間積分法	134
2.2.1	基本的な時間積分アルゴリズムの導出	135
2.2.2	時間積分の打ち切り誤差と全エネルギーの誤差の関係	139
2.2.3	丸め誤差	143
2.2.4	時間反転対称性	144
2.2.5	シンプレクティック性	155
2.2.6	時間積分法のまとめ	166
2.3	力とポテンシャルの計算	167
2.3.1	分子モデル	168
2.3.2	力場の関数形	169

x 目 次

2.3.3	共有結合に関する相互作用	171
2.3.4	非共有結合力 I: レナード=ジョーンズ力	174
2.3.5	非共有結合力 II: クーロン力 (Coulomb, Electrostatic, 静電相互作用)	176
2.3.6	力とポテンシャルの計算のまとめ	197
2.4	アンサンブル	198
2.4.1	NVE アンサンブル	199
2.4.2	NVT アンサンブル (定温)	199
2.4.3	NPT アンサンブル (圧力温度一定)	216
2.4.4	アンサンブルのまとめ	220
2.5	拘束と束縛	221
2.5.1	分子座標の拘束: BELLY 法	221
2.5.2	分子座標の束縛	222
2.5.3	並進運動と回転運動の拘束 (凍結)	222
2.5.4	共有結合長の拘束: RATTLE 法	225
2.5.5	拘束と束縛のまとめ	234
2.6	出力解析	235
2.6.1	エネルギーに関する物理量	237
2.6.2	分子構造とダイナミクス	238
2.6.3	溶媒やイオンの解析	246
2.6.4	MD 計算と解析の実例	251
2.6.5	出力解析のまとめ	258
2.7	第 2 章のまとめ	259
第 3 章	化学反応の計算科学	265
3.1	化学反応とその理論	265
3.1.1	化学反応をどう捉えどう表わすか	265
3.1.2	巨視的な化学反応理論 I—化学反応速度論—	269
3.1.3	巨視的な化学反応理論 II—反応拡散系と散逸構造—	283
3.1.4	微視的な化学反応理論—遷移状態理論—	293

3.2	化学反応の分子理論	302
3.2.1	化学反応の分子シミュレーション	303
3.2.2	非経験的 (ab initio) 量子力学的分子動力学法 —孤立分子系のダイナミクス—	309
3.2.3	半経験的 (Semi-empirical) 量子力学的分子動力学法 —分子集合系のダイナミクス—	321
3.2.4	QM/MM 分子動力学法 —凝縮系化学反応のダイナミクス—	326
3.2.5	自由エネルギー勾配法—凝縮系化学反応の熱統計力学—	334

索 引	361
-----	-----

