

Q11. 1.第一原理計算についての参考資料

1) 表面科学の基礎 (現代表面科学シリーズ)

日本表面科学会 (編集), 板倉 明子 (編集)

出版社 : 共立出版 (2013/6/22)

この第6章に50ページほどで電子状態計算の基礎とその表面科学的問題に関する応用について記載していますので、まずこれを読んでいただくと、概要がわかるのではと思います。

2) 計算機マテリアルデザイン入門 (大阪大学出版会, 2005)

笠井秀明、赤井久純、吉田博編

この本にはより詳しく、電子状態計算手法について記載されています。

3) 密度汎関数法の発展 (丸善, 2012)

赤井久純、白井光雲編

これは2)の続編の書籍です。

4) R.G. Parr and W. Yang Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, (Oxford Univ. Press, 1989)

これは、密度汎関数理論についてよりわかりやすく、詳細に記述されていますので、より本格的に理解をするには大変良い本だと思います。(森川 良忠)

2.量子化学についての参考資料

物理化学の教科書の量子化学に関する章が参考になります。入門的なところはこのあたりかと思います。

1. アトキンス物理化学 上下 東京化学同人 p.297-p597 第7-13章

2. マッカーリ・サイモン 物理化学 分子論的アプローチ。上巻がほぼ量子化学の内容です。

3. ボール物理化学 上下 化学同人 p.313-p665 第9-15章

1,3は量子化学に関するところが上巻、下巻にわたっています。

計算などが詳しい方がよければ、

4.初等量子化学—その計算と理論 化学同人 大岩 正芳 (著)。

(初等とありますが、決して簡単なものではないかと思います)

また大学院レベルの発展的な内容であれば、以下の本があります。

5.大学院講義物理化学 I(第2版): 量子化学と分子分光 東京化学同人

幸田 清一郎, 染田 清彦, 阿波賀 邦夫, 小谷 正博 編

3つの分冊になっていますが、第一分冊が量子化学に関するところになります。

(中澤 康浩)