

『新しい量子化学』

A. ザボ, N. S. オストランド著、大野公男、阪井健男、望月祐志訳／東京大学出版会

量子化学計算をやっていていつも思うのは、教科書に記載されている基礎的な事項と実際に使う非経験的分子軌道法の内容のギャップである。教科書では、波動関数の説明からValence band理論、Molecular orbital理論、あとはせいぜいHuckel法の説明で終わる。一方、実際に使う非経験的分子軌道法について記述した教科書は少ない。基本的には計算法の違いはいわゆるSchrödinger方程式（多体問題）の近似解を求める方法の違いだけなのだが、やっぱり気になることが多い。しかし、実際に計算に使う理論を知るためには学術論文を読むしかなく、なかなか理解するのは大変である。自身が学生の頃、Guassianという量子化学計算ソフトでHartree-Fock法やMoller Plesst法などをよく使ったが、その理論も知らずに使うのはと思って、買ったのが今回紹介した本である。線形代数、行列、変分法と数学の準備から入って、多電子系の波動関数の記述法まで記述がされていて非経験的分子軌道をはじめて学ぶ人にも配慮した内容になっている（少し難解だが）。古い本なので、今、よく使われている密度汎関数法に関する記述はないが、Hartree Fock法、Moller Plesst法、CI法、Coupled Cluster近似などの計算法の原理、そして、量子化学計算には欠かせない基底関数についても説明がある。最近は特に理論の背景を知らなくとも計算が手軽にできるようになったし、ノウハウ本的な量子化学計算の教科書も多いが、一度は骨のある数学の基本原則から“量子化学”の骨の髄を味わってみるのもいいのではと思う。

執筆 者 紹 介

村上 能規

物質・材料系助教。平成21年4月より長岡高等専門学校准教授。専門領域は、物理化学。

『書名』 著者名(翻訳者名) 出版社または文庫・シリーズ名 出版年 税込価格
『新しい量子化学』上・下巻 A. ザボ, N.S. オストランド著 (大野公男、阪井健男、望月祐志) 東京大学出版会 1987-1988年 8,610円

[ブックガイド目次へ](#)