

---

## 1 量子化学計算の原理—分子軌道法と密度汎関数法—

---

1.1	分子軌道法とは	1
1.2	分子軌道計算の基礎	2
1.2.1	Hartree-Fock 近似	2
1.2.2	配置間相互作用 (CI: configuration interaction) 法	7
1.2.3	基底関数	9
1.2.4	有効内殻ポテンシャル	12
1.2.5	エネルギー勾配法	13
1.3	単参照理論	15
1.3.1	多体摂動論	15
1.3.2	結合クラスター理論	18
1.3.3	結合クラスター線形応答理論	23
1.4	多参照理論	28
1.4.1	MCSCF 法	28
1.4.2	MRCI (多参照 CI, multireference CI) 法	29
1.4.3	多参照摂動論と多参照結合クラスター理論	32
1.5	密度汎関数法	34
1.5.1	密度汎関数法の理論的基礎	35
1.5.2	近似密度汎関数	41
1.5.3	密度汎関数計算方法	42
1.5.4	時間依存密度汎関数法	45
1.6	半経験的分子軌道法	48
1.6.1	半経験的分子軌道法とは	48
1.6.2	拡張 Hückel 法	50

1.6.3	ZINDO 法	50
1.6.4	MNDO, AM1, PM3 および PM5 法	51
1.6.5	生成熱の定義	53
1.6.6	代表的ハミルトニアンに関する議論	54
1.7	量子化学計算の拡張	59
1.7.1	溶媒効果	59
1.7.2	ONIOM 法	75
1.7.3	相対論的效果	81
1.7.4	エネルギー微分の利用	87

## 2 量子化学計算

2.1	量子化学計算の実際	95
2.1.1	量子化学計算を始めるにあたって	95
2.1.2	計算法と基底関数	96
2.1.3	振動解析計算からわかること	113
2.1.4	遷移状態を決める	124
2.1.5	分子軌道を解析する	134
2.1.6	ポピュレーション解析	141
2.1.7	電子状態の確認	146
2.1.8	コンピュータグラフィックスの利用	149
2.1.9	量子化学計算の実際の応用例	154
2.1.10	まとめ	162
2.2	密度汎関数計算の実際	164
2.2.1	方程式の解法	164
2.2.2	DF 法の発展の歴史と 1990 年代の進歩	165
2.2.3	HF 法と TF 法の比較	168
2.2.4	ハイブリッド法	169
2.3	量子化学計算の応用	171
2.3.1	有機反応	171
2.3.2	有機金属反応	181
2.3.3	固体と表面	193
2.3.4	生体分子 I	202
2.3.5	生体分子 II	210
2.3.6	ナノサイズ分子	217
2.3.7	励起状態と電子スペクトル	225

2.3.8 磁性	235
----------	-----

### 3 分子力学法

3.1 分子力学法の基礎知識	248
3.1.1 分子力場	254
3.1.2 構造最適化	265
3.1.3 基準振動解析	269
3.1.4 熱力学関数	271
3.1.5 分子スペクトル解析	273
3.1.6 溶媒効果	274
3.2 分子力学法の応用	276
3.2.1 立体配座解析と多配座問題	276
3.2.2 配座探索法	278
3.2.3 多配座解析	285
3.2.4 配座クラスタリング	289
3.3 分子力学法の実習 (CONFLEX 2000)	294
3.3.1 ハードウェアとオペレーティングシステム	294
3.3.2 必要なソフトウェア	295
3.3.3 入力ファイル	296
3.3.4 構造最適化と基準振動解析	297
3.3.5 配座探索の実習	300
3.4 おわりに	311

### 4 分子シミュレーション法

4.1 分子シミュレーション法を使うために	315
4.1.1 求めたい物理量は何か	315
4.1.2 シミュレーション規模についての制約	323
4.1.3 粒子間力の計算と電子状態の取扱い	325
4.2 分子運動の時間的理解	326
4.2.1 分子動力学法の概要	326
4.2.2 必要な入力データと手に入る情報	347
4.2.3 分子動力学法の応用と展開	354
4.2.4 より高度な分子シミュレーション——量子効果——	361
4.3 分子運動の統計的理解	365

4.3.1	モンテカルロ法の概要	365
4.3.2	自由エネルギーの計算	369
4.3.3	コンピュータプログラム	373
4.3.4	必要な入力データ	374
4.4	高分子のコンピュータシミュレーション	377
4.4.1	はじめに	377
4.4.2	高分子のモデルと計算手法	378
4.4.3	モンテカルロ (MC) 法	381
4.4.4	分子動力学 (MD) 法	384
4.4.5	高分子物性の予測	391
4.4.6	おわりに	392
4.5	グラフィカルユーザインタフェース (GUI)	393
4.5.1	GUI の重要性	393
4.5.2	GUI の設計・開発	396
4.5.3	グラフィックスソフトウェア例	403
4.5.4	今後の GUI ソフトウェア	418

## 5 化学情報データベース

5.1	データベースとは	421
5.1.1	化学情報の特長	422
5.1.2	有効な検索の仕方について	423
5.2	データベース	424
5.2.1	文献データベース	425
5.2.2	特許データベース	430
5.2.3	化学物質データベース	432
5.2.4	化学反応データベース	437
5.2.5	物性・スペクトル・結晶構造	439
5.2.6	安全性・毒性・法規制	443
5.2.7	ゲノム関連データベース	444
5.3	データベース提供サービス	445
5.3.1	SciFinder/SciFinder Scholar	445
5.3.2	CA on CD	461
5.3.3	CrossFire	463
5.3.4	Web of Science	465
5.3.5	STN/STN Easy	466

5.3.6	JOIS .....	467
5.3.7	PATOLIS .....	470
5.3.8	MDL ISIS .....	471
5.4	電子ジャーナル.....	472
5.4.1	電子ジャーナルの種類.....	472
5.4.2	データベース全文とのリンク.....	472
5.5	Web上の化学情報 .....	474
5.5.1	検索エンジン.....	474
5.5.2	ディレクトリ.....	475
5.5.3	官公庁・公共機関のデータベース.....	475
5.6	おわりに.....	477
	索引 .....	479