

# 量子化学計算入門

## 目次

1. 概要 .....	1
2. 環境 .....	1
2.1 無料で使えるもの .....	1
2.2 有料で使えるもの .....	1
3. 数式 .....	1
4. 発表スライドへのリンク .....	1

## 1. 概要

量子化学計算に入門してみよう。

## 2. 環境

量子化学計算の世界ってほんと広い。たくさんのソフトウェアがある。

### 2.1 無料で使えるもの

- GAMESS
- MPQC etc.

### 2.2 有料で使えるもの

- Gaussian
- Molpro etc.

## 3. 数式

数式を眺めてみよう。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{(r)} \right\} \psi_{(r)} = E \psi_{(r)}$$

## 4. 発表スライドへのリンク

Slides