

ゼミ 2026 年 1 月 13 日

『量子化学計算入門』 p1

概要

量子化学計算に入門してみよう。

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。

無料で使えるもの

- ▶ GAMESS
- ▶ MPQC etc.

有料で使えるもの

- ▶ Gaussian
- ▶ Molpro etc.

数式

数式を眺めてみよう。

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

次回

- ▶ がんばる