

目標

電子相関法の重要性を体感する

具体的なテーマ

H₂分子の STO-3G 基底関数を用いた時の分子軌道積分を与えるので、HF, Full CI (基底状態+励起状態), MP2 のポテンシャル曲線を、エクセルを用いて描く。**そのための導出を全部自分で行う。**

提出物：

演習で行った内容をレポートにして提出。(必ずしもすべてを書かなくてよいが、自分の理解を整理するためのものである)

またエクセルデータはこちらの HP から入手してください。

http://www.comp.tmu.ac.jp/minoria/grad_sc/sto3g_fullCI_kadai.xlsx

メッセージ：

この講義内容は細かくてめんどくさいですが、難しくはないです。一つ一つ納得してから進めば計算できますし、HF 法や MP2 法が H₂ 分子のポテンシャル曲線すらちゃんと描けない理論であることを体感できます。学生さん同士、また私とも自由に話し合いながら進めていきましょう。