

「密度汎関数法の基礎」 正誤表

ページ	行	誤	正
v	23	大阪大学大学院工学系研究科	大阪大学大学院基礎工学研究科
29	1	$E_n = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n=0,1,2,\dots)$ (1.50)	$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (v=0,1,2,\dots)$ (1.50)
88	7	[Kutzelnigg, 1991]	[Kutzelnigg, 1991; Klopper et al., 2006]
95	6	これを「制限つき」探索法とよぶのは、外場ポテンシャル以外の演算子の期待値のみに制限しているからである。	これを「制限つき」探索法とよぶのは、特定の電子密度 ρ を与える波動関数 Ψ に制限しているからである。
153	9	$\bar{E}_{x\sigma}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{ P_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ^2}{ \mathbf{r} - \mathbf{r}' } \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{2r}$ (6.17)	$\bar{E}_{x\sigma}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{ P_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ^2}{ \mathbf{r} - \mathbf{r}' } \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{2r} \rho_\sigma(\mathbf{r})$ (6.17)
169	15	スピン軌道相互作用	スピン・軌道相互作用
195	4	ブリュアン定理 3.4 節参照)	ブリュアン定理 (3.4 節参照)
204	20	交換・相関ポテンシャルにも自己相互作用誤差が含まれると、	交換・相関ポテンシャルに自己相互作用誤差が含まれると、
212	3	逆に、密度勾配が電子密度に比べて十分に大きい極限では、運動エネルギーと相関エネルギーは次のようにふるまう [Dreizler and Gross, 1990]。	逆に、密度勾配が電子密度に比べて十分に大きい極限 (高密度勾配・低電子密度極限) では、運動エネルギーと相関エネルギーは次のようにふるまう [Dreizler and Gross, 1990; Ma and Brueckner, 1968]。
216	4	リーブ・オクスフォード束縛条件	リーブ・オクスフォード束縛条件