

# 正誤情報

このたびは森北出版株式会社発行の書籍をお買い求めいただき、誠にありがとうございました。下記の書籍につきまして誤りのある箇所がございましたので、お詫びし訂正させていただきます。

2021年6月21日 森北出版株式会社 生産マネジメント部

## タイトル

# 動かして理解する 第一原理電子状態計算

## 正誤対象

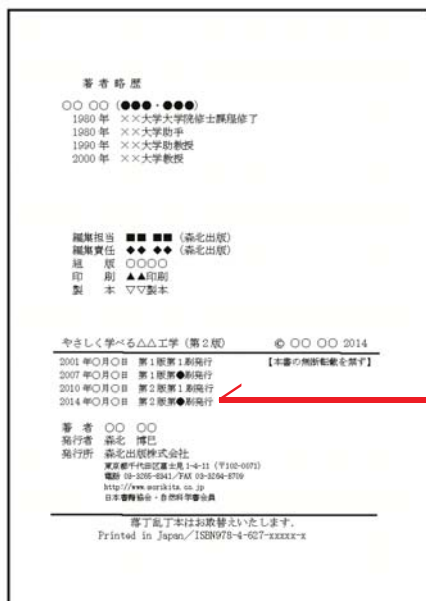
お手持ちの書籍の刷数をお調べのうえ、下の表をご覧ください。正誤表内の一番左に「対応刷数」という列がございます。該当する刷数の訂正情報をご参照下さい。

なお、刷数につきましては下記「刷数の調べ方」をご参照ください。

お持ちの本の刷数	
1	対応刷数 1 より 2 までをご参照ください
2	対応刷数 2 をご参照ください
それ以降	現在把握している訂正情報はございません

## 刷数の調べ方

本の一番後ろのページ(広告等除く)に下図のようなページがございます。ご参照いただき、お持ちの本の刷数をお調べください。



日付の最も新しい行に記載された数字がお持ちの本の刷数となります

対応 刷数	頁	行数, 図・ 表・式番号	誤	正
1	34	上の網掛け 2行目	<code>% mkdir work</code>	<code>% mkdir /mnt/c/Users/maezono/work</code>
1	34	下の網掛け 2行目	<code>% ln -s /work /mnt/c/Users/maezono/work</code>	<code>% ln -s /mnt/c/Users/maezono/work</code>
2	34	脚注 1	(末尾に右を追加)	なお, 'maezono'の箇所は例示なので, 各自の環境に応じて読み替えてください.
2	35	上の網掛け	<code>% cd</code> <code>% ls</code>	<code>% cd work</code> <code>% pwd</code>
1	37	4行目	「 <code>setupMaezono.tar.gz</code> 」	「 <code>linuxBasic.tar.gz</code> 」
2	50	下の網掛け 3行目	<code>quartz_alpha.in ...</code>	<code>None.in ...</code>
2	51	1行目	となって「 <code>quartz_alpha.in</code> 」という…	となって「 <code>None.in</code> 」という…
2	51	上の網掛け 1行目	<code>% more quartz_alpha.in</code>	<code>% more None.in</code>
2	54	下の網掛け 2~5行目 12行目	<code>calculation = '__scf ' !added</code> <code>restart_mode= '__from_scratch ' !added</code> <code>prefix='__qa ' !added</code> <code>outdir='__out_qa ' !added</code> <code>:</code> <code>occupations = '__fixed ' !added</code>	<code>calculation = 'scf ' !added</code> <code>restart_mode= 'from_scratch ' !added</code> <code>prefix='qa ' !added</code> <code>outdir='out_qa ' !added</code> <code>:</code> <code>occupations = 'fixed ' !added</code> ※「誤」にある青下線部の空きをつめる
2	67	2つ目の 網掛け 4行目	<code>outdir='out_qa ' !modified here</code>	<code>outdir='out_qa '</code>
2	68	1つ目の 網掛け 最下行	<code>/</code>	<code>/</code> ※スラッシュのあとに改行を入れる

2	73	7行目	…, 「/」を使って改行…	…, 「\ (バックスラッシュ)」を使って改行…
1	81	6行目	get_kpath.py を以下のように作成します.	gen_kpath.py を以下のように作成します.
2	95	11行目	… 「quartz_beta.in」を qa_scf.in として…	… 「quartz_beta.in」を qb_scf.in として…
2	95	13行目	…, outdir='out qa'は'out qa'とします.	…, outdir='out qa'は'out_qb'とします.
2	96	4つ目の 網掛け 1行目	% grep 'number of electrons' *out	% grep 'number of electrons' *.out
2	100	下から 9, 8, 7 行目	Si <sub>2</sub> ユニット (3か所)	SiO <sub>2</sub> ユニット (3か所)
2	121	図 5.5	$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{ext}}(\vec{r}) \hat{U}_{\text{ele.}}^{(\text{eff})}[n] \right] \cdot \psi_j(\vec{r}) \varepsilon_j \cdot \psi_j(\vec{r}) \quad \dots$	$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{ext}}(\vec{r}) \hat{U}_{\text{ele.}}^{(\text{eff})}[n] \right] \cdot \psi_j(\vec{r}) = \varepsilon_j \cdot \psi_j(\vec{r}) \quad \dots$
2	121	下から 12行目	4.4節の演習では, PZ/PBE/PW91/BLYP といった…	4.4節の演習では, PZ(LDA)/PBE/PW91/BLYP といった…
2	133	下から 12行目	「7割型占有っぽい」	「7割方占有っぽい」
2	135	3つ目の 網掛け 1行目	% grep ! gauss_*	% grep ! gauss_*.o
2	136	1つ目の 網掛け 1行目	% grep ! mp_*	% grep ! mp_*.o
2	150	11行目	画層をドラッグして…	画像をドラッグして…
2	155	16行目	…よりよい解 (この場合は新規構造) が見つける手法…	…よりよい解 (この場合は新規構造) を見つける手法…