



Kyushu University, Center for Molecular Systems (CMS)
The 29th CMS Seminar

多参照電子状態理論の最近の進展
～基礎理論開発と多核金属錯体や炭素 π 共役系への応用～

倉重 佑輝 先生 (分子科学研究所)

平成27年1月23日(金) 17:00-18:00
伊都キャンパス ウエスト4号館 314号室
(物質系4番講義室)



【要旨】

安定構造にある分子の電子状態は多くの場合、Hartree-Fock法や密度汎関数法のように分子軌道の軌道エネルギーの低いものから順に電子対が詰まった一つの電子配置を用いて理解されます。これに対し励起状態や結合解裂をともなう化学反応、また金属錯体など開殻系の電子状態の記述には(一つの電子配置ではなく)複数の電子配置の重ね合わせが必要になることから、多参照理論と呼ばれる独特の理論体系が構築されてきました。本講演では多参照電子状態理論の拡張に対する演者の最近の取り組みと、開発した理論を用いた多核金属錯体や炭素 π 共役系への応用的研究についてご紹介します。

連絡先 楊井 伸浩 e-mail: yanai@mail.cstm.kyushu-u.ac.jp 内線(2836)
九州大学大学院工学研究院 応用化学部門 分子システム科学センター(CMS)

Free Admission