

第165回 化学コロキウムのお知らせ

タイトル 「非調和振動理論の最先端と展望」

講師 山梨大学燃料電池ナノ材料研究センター特任講師 八木清先生

日時 2010年12月9日(木) 午後4時—5時

場所 大学院講義室 8-304

要旨：近年の電子状態理論と計算機技術の発展により，第一原理に基づき多原子分子の振動スペクトルを計算することが可能となってきた．原子数が増え，分子が複雑になると，赤外やラマン分光法で得られる振動スペクトルを解釈するのは困難となる．そのため，理論計算による支援は非常に有用とされている．本講演では非調和振動理論の最近の発展と展望をレビューする．振動計算は，非調和ポテンシャルを構築する部分と振動 **Schrödinger** 方程式を解く部分の2か所から構成される．前者は， $3N - 6$ 個 (N は原子数) の自由度を持つ分子ポテンシャルエネルギー曲面を構築する作業であり，多変数関数をいかに効率よく構築するかが肝である．後者では，平均場理論を起点とする量子多体問題の一般解法が分子振動問題に適合するよう，振動 SCF 法，CI 法，摂動法，クラスター法が提案されている．振動理論の技術開発が化学分野全般にもたらすインパクトについて解説する．

大学院集中講義（化学特論 I）の一部としてセミナーを開催いたします。多数のご参加をお待ちしております。

連絡先 分子物質化学専攻 橋本健朗 (3543, hashimoto-kenro@tmu.ac.jp)