

21 世紀 COE 講演会報告書

工学研究科 田中一義

研究集会名：21 世紀 COE 講演会

講演者：Professor KEE HAG LEE

(Department of Bionano Chemistry, Wonkwang University, Korea)

演題：Structure, Reactivity, and Dynamics of Fullerene Clusters: Computational Study

(フラーレンクラスターの構造、反応性、及び動力学に関する計算的研究)

場所：京都大学大学院工学研究科 A 2 棟 303 号室 (桂キャンパス)

日時：平成 19 年 3 月 1 日 (木) 16:00~17:30 まで

参加者：学部学生・大学院学生・教員

参加者総数：17 人

【 講演内容 】

フラーレンの電子状態及びその反応性は、フラーレン化学の基礎となる重要な情報を与える。本講演者は主として韓国及び米国を中心に活躍している計算化学者で、上記について先駆的な業績をあげている。講演は特に学部4回生及び大学院生にもよく分かるように、フラーレン C60 及び C70 の反応部位とその反応速度について、フラーレン表面の曲率によるパイ軌道の偏向性及び福井関数を組み合わせて解析することをメインに展開され、興味深いものであった。またフラーレン2量体の電子状態についてもふれられた。講演後は活発な討論が行われ、特にフラーレンイオンのヤーン・テラー変形による対称性低下などについての意見交換も行った。

本講義はわかりやすい英語で行われ、学生の英語力向上にも寄与をした。

