

21COE特別講演

相関因子を用いた分子軌道法の開発

天能 精一郎 先生

名古屋大学大学院情報科学研究科

日時：2月5日(月)17:00—18:00 場所：理学部6号館571号室

動的電子相関は、主配置の違いを通じて反応熱や励起エネルギーに直接影響を与える重要な効果であるが、電子間に存在するカスプのために一電子基底関数展開の収束が非常に遅いことが知られている。本講演では、従来の一電子基底関数に加えて、二電子基底関数であるジェミナル基底を用いた高精度分子軌道法を紹介する。特に、私たちが最近提案したSlater型ジェミナルの有効性を中心に分野の動向を述べる。

連絡先： 谷村吉隆（内線4017）