

京都大学化学連携研究教育拠点(21世紀COE)講演会

講演者 : Professor KEE HAG LEE

(Department of Bionano Chemistry, Wonkwang University, Korea)

日時 : 平成 19 年 3 月 1 日 (木) 16 時から 17 時まで

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)

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)

【 講演内容 】

気相中のフラーレンクラスターの反応部位は、反応速度定数の実験値とフロンティア分子軌道の福井関数を組み合わせて解釈できることを示す。またフラーレン 2 量体は人工光合成、新規分子系の電子デバイス、超分子化学などに関連して興味深い。ここでは荷電フラーレン 2 量体の構造及び電子的性質についての理論的な解析結果を紹介する。さらにフラーレン 2 量体の相対的な安定性が、電荷とスピン状態のカップリングによって説明できることも示す予定である。

連絡先 : 分子工学専攻 田中 一義 (電話 : 075-383-2549)