



HOKKAIDO UNIVERSITY

AMBITIOUS LEADER'S PROGRAM

Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science

Ambitious 物質科学セミナー

新領域 計算分子分光学の展開

平野 恒夫 氏

お茶の水女子大学・名誉教授



平成 28 年 10 月 18 日 (火) 15:30~17:00
理学部 7 号館 2 階 219/220 室

計算化学の一環として、計算分子分光学(Computational Molecular Spectroscopy)を提唱してほぼ20年、今や実験の高分解能分子分光学と比肩する精度の予測が可能になった。計算分子分光学では、分光精度 (cm^{-1} を議論出来る精度) を持つ高精度なポテンシャルエネルギー曲面をab initio計算で定めて、摂動論または振動回転の波動関数から種々の分子定数を求め、未測定分子であれば振動回転スペクトルをシミュレートして示す。今回は、分子分光学実験との相補性を概観した後、直線分子の振動回転平均構造に関して、Herzberg以来、何十年も分子分光学で採用されてきた基礎概念に誤りがあることを理論で示したうえ、報告されている実験データの再解釈を試みた我々の最近の研究について紹介する。

連絡先：北海道大学大学院理学研究院化学部門 武次徹也

(Tel: 011-706-3535, Mail: take@sci.hokudai.ac.jp)