

# 計算化学入門シリーズ

(学部3年生・4年生および大学院生対象)

**計算化学入門1**            2003年11月28日(金)10:50~12:20

**計算化学入門2**            2003年11月28日(金)13:10~14:40

場所: 理学部 B109 室

担当: 平野 恒夫 先生

(広島大学客員教授・お茶の水女子大学名誉教授)

各回のテーマと内容の概要:

「計算化学入門1」        反応論。星間分子の化学。

「計算化学入門2」        量子化学の最前線。分光定数の予測をめぐる。

どこまでの精度で予測が可能になっているか。

「計算化学入門シリーズ」は、全5回程度を予定しています。

次回予告: (12月あるいは1月を予定しています)

分子軌道法の計算に必要な基底関数の選び方, 計算方法(DFT, CI, MCSCF  
など)の適当な選択, 得られた分子軌道の解釈, 等について。