

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3 2004年1月19日(月)13:10～14:40

計算化学入門4 2004年1月19日(月)15:00～16:30

場所: 理学部 B301 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)

内容の概要:

分子軌道法の考え方、実際の計算の際に基底関数や計算方法で注意すべきこと、Post Hartree-Fock 計算の手法(電子相関の扱い方)など、実際に分子計算を行うときに必要となる事柄を解説する。