

「MCSCF+MP2法を用いたラジカル反応系の理論研究」

講演者氏名	小関史朗
所属	三重大学工学部分子素材工学科
講演タイトル	「MCSCF+MP2法を用いたラジカル反応系の理論研究」
講演概略	ラジカル中間体を經由する化学反応をMCSCF+MP2法を用いて行った2～3の研究を紹介し、今後望まれる計算機の規模について言及する。