

「基底・励起状態における重原子分子の相対論的效果」

講演者氏名	中嶋隆人
所属	東京大学大学院工学系研究科応用化学科
講演タイトル	「基底・励起状態における重原子分子の相対論的效果」
講演概略	<p>最近我々は、重原子分子に対し相対論的效果を考慮するため、計算コストの高い Dirac方程式を解く代わりに、Dirac方程式の持つsmall成分を消去することにより、RESC(relativistic scheme by eliminating small components)法と呼ぶ新しい相対論的電子状態理論を開発した。この方法は、容易に既存の非相対論的電子状態プログラムに組み込むことができ、どんな電子状態理論に対しても相対論的效果を考慮することが可能で、対応する非相対論的電子状態理論とほぼ同じ計算コストしか必要としない。本講演では、RESC法の理論および幾つかの重原子分子の基底・励起状態に対する応用結果について発表する。</p>