

## 理論化学セミナー

1981年10月 - 1992年6月

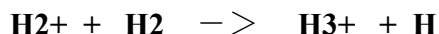
1. 1981.10.30 加藤重樹 (分子研)  
Energy Transfer in Chemical Reaction
2. 1981.11.20 鷺田伸明 (国立公害研)  
最近の興味ある基底状態の気相反応  
井上元 (国立公害研)  
最近の興味ある励起状態の気相反応
3. 1981.12.18 W.T.Borden (U.of Washington)  
Methylenecyclopene rearrangement
4. 1982. 1.22 岡田勲 (東工大)  
液体の分子動力学シミュレーション
5. 1982. 2.13 梶本興亜 (東大)  
分子内振動緩和と化学反応
6. 1982. 3.19 井川明 (東京電気大)  
MCSCF解の求め方について
7. 1982. 4.16 佐藤伸 (東工大)  
素反応速度の測定 - 反応速度論とのかかわりあいについて -
8. 1982. 5.21 中辻博 (京大)  
種々の励起状態やイオン化状態の電子相関理論と  
そのいくつかの応用
9. 1982. 6.18 高塚和夫 (分子研)  
分子の光分解の理論
10. 1982. 7.23 P.Wolynes (Illinois Univ.)  
New Pathway in Chemical Quantum Physics
11. 1982. 9.16 塚田 捷 (東大)  
吸着分子の脱離反応のダイナミクス
12. 1982.11.19 小林 宏 (東工大)  
大きな分子の励起状態の計算 - Screen potentialの方法 -
13. 1982.12.17 阿知波洋次 (分子研)  
多光子イオン化光電子分光法の開発とその応用
14. 1983. 1.27 高木秀一 (北里大)  
水素分子イオンと電子系における動的諸過程
15. 1983. 異 和行 (大阪大)  
遷移金属錯体の理論
16. 1983. 4.22 野平博之 (埼玉大)

軌道相の最小変化 — 福井理論およびWoodward-Hoffmann則の論理構造  
とその統一理論 —

17. 1983. 5.27 広田文彦 (静岡大)  
光合成の初期過程と電子移動の理論
18. 1983. 6.17 笛野高之 (大阪大)  
一中心ラジカルの電子状態と反応性
19. 1983. 7.21 梅山秀明 (北里大)  
酵素反応の力学
20. 1983. 9.22 幸田清一郎 (東京大)  
量子ビート減衰と分子内緩和の一側面
21. 1983.10.21 梅本宏信 (東工大)  
Mg(1P1)より生成するMgHの初期状態分布
22. 1983.11.24 永瀬 茂 (横国大)  
第 I V 族の不飽和化合物
23. 1983.12.22 北浦和夫 (大阪市大)  
分子の電子状態計算のための有効ポテンシャル法とその応用
24. 1984. 1.27 高田俊和 (N E C、Univ. of Chicago)  
電子相関を含む原子価有効ハミルトニアン。  
Li-Li ポテンシャルエネルギー曲面への応用とパラメータの解析
25. 1984. 2.23 山辺信一 (奈良教育大)  
分子軌道法による脱離反応の研究
26. 1984. 3.23 松下利樹 (慶応大)  
多原子系の大振幅振動におけるモード混合とカオス  
— 非線形動力学における側面 —
27. 1984. 4.27 加藤 直 (都立大)  
光散乱と非電解水溶液の混合状態
28. 1984. 5.18 E.R.Davidson (U.of Washington) \$  
Electronic and Geometrical Structures of Some  
Organic Radicals
29. 1984. 6.29 田中秀樹 (分子研)  
計算機シミュレーションからみた水溶液の構造と性質
30. 1984. 9.28 平尾公彦 (名古屋大)  
波動関数のクラスター展開法による電子相関問題
31. 1984.11. 2 J.Koutecky (Univ. of Berlin) \$  
Electronic Structure of Metal Clusters  
V.Bonacic-Koutecky (Univ. of Berlin)  
Photochemistry of some Organic Molecules.
32. 1984.11.15 E.Clementi (IBM, Kingston)  
Computer Simulation in Quantum Chemistry and Statistical  
Mechanics Using a New Parallel Supercomputer

33. 1985. 1.28 Dedieu (Univ. of Strassburg)  
Theoretical Studies on Organometallic Systems.  
Activation and Reactivity of the Carbonyl Ligands.
34. 1985. 2.21 Yoon Sup Lee (KAIST)  
Many body Perturbation Theory and Coupled Cluster  
Calculations for Small Molecules.
35. 1985. 3.22 Z.Latjka (分子研)  
Theoretical Studies of Intermolecular Interaction
36. 1985. 4.26 R.Fucks (セイコー電子)  
Two New Anisotropic Potential Energy Surfaces for N<sub>2</sub>-He:  
The Use of Hartree-Fock SCF Calculations and a Combining  
Rule for Anisotropic Long-Range Dispersion Coefficients.
37. 1985. 5.24 岩崎紀子 (東大物性研)  
黒りん単結晶の負磁気抵抗とアンダーソン局在
38. 1985. 6.28 工藤貴子 (横国大)  
第4 B族元素を含む2重結合化合物の構造, 安定性, および  
反応性について
39. 1985.10. 4 寺前裕之 (N T T 武蔵野)  
Polymer の ab initio MO 計算
40. 1985.11. 1 笈川節子 (千葉大)  
低温プラズマ化学反応の理論的研究. その特徴, 応用と解析
41. 1985.11.29 生田 茂 (都立大)  
イオンクラスター反応とイオンの水和
42. 1985.12.20 能勢修一 (慶応大)  
結晶構造のシミュレーション
43. 1986. 1.10 山口幸男 (Univ. of California, Berkeley)  
The third Order Derivatives of the Electronic Energy.
44. 1986. 2.20 松下叔夫 (大阪市大)  
Calculation of Spin-Forbidden Radiative Transitions.
45. 1986. 4.24 島 信幸 (東京大)  
固体表面での動力学
46. 1986. 5.30 Yuan T. Lee (Univ. of California, Berkeley) \$  
Recent Investigation on Reaction Dynamics.  
Spectroscopy and Photochemistry by Molecular Beam Method
47. 1986. 6.27 三上直彦 (東北大)  
電子励起状態からのレーザー分光
48. 1986. 7.18 沢田真一 (NEC 基礎研)  
金属表面における電荷およびエネルギーの移行過程
49. 1986. 9. 8 Russell J. Boyd (Dalhouse Univ.)  
Electron Correlation and Chemical Effects.
50. 1986. 9.19 G. Schatz (Northwestern Univ.) \$  
1) Introduction to Chemical reaction Dynamics.

## 2) Theoretical Studies of the Reaction



51. 1986.10.24 Stephen R. Leone (Univ. of Colorado)  
Laser Probing of Chemical Reaction Dynamics
52. 1986.11.28 関野秀男 (Univ.of Florida)  
Coupled Cluster 理論による各種物理量の計算
53. 1986.12.19 簗野嘉彦 (東工大)  
分子励起状態とその解離過程
54. 1987. 1.22 大峰 巖 (分子研)  
気相、液相における光化学反応のダイナミクス および  
水の中のダイナミカルな揺動について
55. 1987. 2.27 藪下 聰 (分子研)  
Bound State Method の 共鳴状態への応用
56. 1987. 4.24 高橋三雄 (味の素)  
ポリエン系の電子相関— 摂動論と Coupled Cluster展開
57. 1987. 5.22 古賀伸明 (分子研)  
遷移金属錯体の反応に関する理論計算
58. 1987. 6.12 Ingre Roeggen (Tromso Univ.)  
Intermolecular Interaction Described within a context  
of Extended Geminal Models.
59. 1987. 7.17 渋谷一彦 (東工大)  
NO<sub>2</sub>における分光と反応
60. 1987. 9.25 G. H. F. Diercksen (Munche Tech. Univ.) §  
1) Theoretical Molecular Physics Beyond Number  
Crunching: The Concept of a Knowledge-Based Simulation  
Environment.  
2) A Study of the Reliability of Apparently "Accurate"  
Calculations of Weak Interactions: The Potential  
Energy Curves of Be<sub>2</sub>, Mg<sub>2</sub>, and HeF<sup>-</sup>.
61. 1987.12. 4 中川節子 (蛋白工学研)  
タンパク質のMolecular Dynamics
62. 1987.12.18 P. G. Wolynes 氏 (Univ.Illinois)  
Chemical Reactions in Condensed Phase
63. 1988. 1.22 M.Newton (Brookheavben National Lab.)  
Kinetics of Electron Transfer Reactions
64. 1988. 2.26 松本 信雄 氏 (N T T基礎研究所)  
シリコン高分子科学の現状と将来展望
65. 1988. 3.31 鷹野 景子 氏 (お茶の水大理)  
非経験的分子軌道による原子の酸化状態の研究
66. 1988. 4.28 P.R. Bunker 氏 (Herzberg Inst. of Astrophysics) §  
Structure, Dynamics and Spectra of C<sub>2</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup>
67. 1988. 5.27 Bryan E. Kohler 氏 (Univ. California, Riverside)

- Vibrational Level Dependence of Polyene Photoisomerization from the Photochemical Hole Burning.**
68. 1988. 7.1 村上 明德氏 (三菱化成総合研究所)  
星間分子の量子化学計算
69. 1988. 7.22 青柳 睦 氏 (分子科学研)  
燃焼中の素反応:  $\text{OH} + \text{CO} \rightarrow \text{H} + \text{CO}_2$   
の反応機構
70. 1988. 9.22 Robert J. Buenker 氏 (Universitat Wuppertal)  
Application of large-scale CI calculations
71. 1988. 9.30 小沢啓一郎 (慶大理工)  
Electronic Spectrum of Phenylnitrene.  
天辰 禎晃 (東大教養)  
Excited States of p-N,N-dimethyl-aminobenzonitril.  
Stephen R.Langhoff (NASA Ames)  
Theoretical Studies of the Spectroscopy of Diatomic Molecules.  
石田 俊正 (東大教養)  
Orbital Partitioning of Hellman-Feynman Force.  
橋本 健朗 (慶大理工)  
Analytical Energy Derivative Method with Respect to Orbital Exponents.  
David R. Yarkony (John Hopkins Univ.)  
Ab initio Study of the non-adiabatic Transition Probability .
72. 1988. 10. 27 志田 典弘 (Univ. Minnesota)  
Multidimensional Quantum Tunneling  
in Vibrational Dynamics on Malonaldehyde
73. 1988. 12. 16 菅原 正 (東大教養)  
有機高スピン分子の設計
74. 1989. 1. 19 Andrea Dorigo (分子研)  
Theoretical Studies of Conjugate Addition Reactions  
of Alkylcopper and Dialkylcuprate Reagents
75. 1989. 2. 17 山下 晃一 (分子研)  
光子場下での化学反応動力学の理論的研究.  
遷移状態スペクトロスコピーに向けて.
76. 1989. 3. 17 金森 英人 (東大教養)  
Photochemical Processes of acetylene.  
Studies with IR diode laser kinetic spectroscopy.
77. 1989. 4. 14 本間 健二 (東大教養)  
9,9-ジアントラセンと極性分子のクラスターの電子励起  
状態の挙動. 溶液反応のミクロな描像への接近
78. 1989. 5. 26 小杉 信博 (東大理)

- 遷移金属化合物の内殻吸収スペクトル.
79. 1989. 6. 23 榎 敏明 (東工大理)  
アルカリ金属-グラファイト層間化合物に吸着された  
水素の物性
80. 1989. 9. 14 Ivan Gutman (Kragujevac 大 Yugoslavia) \$  
Origin of Chirality of the Biomolecules
81. 1989. 10. 5 Karl Heinzinger (Max-Planck Inst.) \$  
Recent progress in molecular dynamic simulation  
of aqueous solution
82. 1989. 12. 1 山本 智 (名大理)  
星間分子の分光と化学
83. 1990. 2. 2 Simon Mathieu (分子研)  
Structure and reactivity of hypervalent compounds
84. 1990. 4. 13 Peter Botschiwina (Universitat Kaiserlauten) \$  
Quantum Chemical Calculations on Hydrogen Bonded Complexes
85. 1990. 4. 20 C. Brion (Univ. of British Columbia) \$  
Experimental Quantum Mechanics  
by Electron Momentum Spectroscopy
86. 1990. 5. 25 岡田 孝 (関西学院大情報処理センター)  
化学構造を取り扱う知的システム：類推をいかに実現するか.
87. 1990. 7. 6 青柳 睦 (化学技術研)  
ホルムアルデヒドの高振動励起における振動回転相互作用
88. 1990. 9. 21 丑田 公規 (理化学研究所)  
放射線照射で生じた脂肪族ラジカルカチオン
89. 1990. 10. 26 岡崎 進 (東工大総合理工)  
多原子イオンクーロン流体の構造と動力学
90. 1990. 12. 13 中林 誠一郎 (理化学研究所)  
半導体・液体界面の光挙動
91. 1991. 1. 25 太田 浩二 (大阪工業技術試験所)  
有機非線形光学材料の分子設計
92. 1991. 3. 22 堂免 一成 (東工大 総合理工)  
光を用いた固体表面上の原子・分子に関する研究
93. 1991. 4. 26 Michael Baer (Soreq Nuclear Research Center) \$  
Application of Negative Imaginary Potentials  
to Reactiv (Exchange) Collision
94. 1991. 5. 2 Oreg Charkin (Inst. New Chem. Problem, USSR Acad.Sei.)  
Cluster effect and reactivity of active centers.
95. 1991. 5. 10 Eric Heller (University of Washington) \$  
Time-dependent Approach to CW to Femtosecond  
Spectroscopy

96. 1991. 6. 28 西川 恵子 (横浜国立大教育)  
二成分液体の構造と揺らぎのX線回折研究  
tert-butyl alcoholと水の場合
97. 1991. 8. 28 阿竹 徹 (東工大工材研)  
分子性結晶の熱測定と分子運動  
-- C60 の最新データを含む --
98. 1991. 9. 20 相田 美砂子 (国立ガンセンター・生物物理)  
ab initio force field の導出とその生体系への適用  
-- 生体系のグローバルなシミュレーションをめざして --
99. 1991. 11. 15 足立 聡 (東工大理応用物理)  
カオス系における半古典論について
100. 1991. 12. 14 (1) 岩田末廣 (慶應大理工)  
理論化学セミナーと慶應・理工学部での10年とこれから  
(2) M.S.Gordon (North Dakota 大) \$  
**Interesting Bonding and Structure in Main Group Elements**  
(3) 諸熊奎治 (分子研)  
化学反応の電子構造理論
101. 1992. 2. 20 (1) 田原太平 (神奈川科学技術アカデミー)  
ナノ秒時間分解ラマン分光とその応用  
T1 電荷移動錯体を中心として  
(2) 岩田耕一 (神奈川科学技術アカデミー)  
ピコ秒時間分解ラマン分光とその応用  
S1 分子の分子内および分子間緩和を中心として
102. 1992. 3. 25 (1) 三上 人巳 (名古屋大理)  
分子雲の進化と化学組成  
(2) 梅林 豊治 (山形大理)  
暗黒星雲の化学進化とイオン・分子反応ネットワーク
103. 1992. 4.24 長嶋 雲兵 (お茶の水大理)  
水素クラスターイオンの構造と安定性
104. 1992. 5.14 John H. Frederich (Nevada大) \$  
**Twists and Turns in Photochemistry:  
Slow Motions in Large Molecules"**
105. 1992. 6.19 Debashis Mukherjee \$  
(Indian Association for Cultivation of Science)  
**Multi-Reference Coupled-Cluster expansion Theory**

注) \$印がついている講演者は慶應義塾大学の小泉基金によって援助を受けている。