

第227回化学コロキウムのご案内

題目：有機分子のESR零磁場分裂(微細構造)テンソルの
量子化学計算 ～二つの電子スピンの問題～

講師：豊田 和男 (大阪市立大学理学部化学科 講師)

日時： 12月20日(金) 16:20~17:20 (5限目)

場所： 8号館307室

講演要旨： スピン三重項以上の系は外部磁場が零の場合でも $2S+1$ 個の磁氣的副準位の分裂を生じ得る。この零磁場分裂は ESR 等により実験的に決定されるスピンハミルトニアンのパラメータであるテンソル D として記述できる。有機開殻分子の D の量子化学計算は長い歴史を持つにも関わらず計算例は多くは無い。近年発達した DFT 法や CASSCF 法などによる D の理論計算について述べる。

尚、豊田先生には、12月19日(木)と20日(金)に大学院集中講義「電子スピン共鳴 (ESR) の量子化学」をお願いしています。

連絡先：理工学研究科分子物質化学専攻 波田 雅彦 (hada@tmu.ac.jp)