



Prof. MUKHERJEE Debashis

from India



Mukherjee 教授は、平成 23 年 9 月から 11 月の三ヶ月間、理論・計算分子科学研究領域系に招へい外国人研究職員として滞在される予定です。Mukherjee 教授は、カルカッタ大学で学部から博士課程まで学ばれました。当時は実験のグループに所属されていましたが、独自に理論開発のご研究を進められ、その研究で学位を取得されました。現在は Indian Association for the Cultivation of Science においてラマン分光法の創始者である Raman 教授の記念センター (Raman Center for Atomic, Molecular and Optical

Sciences) に所属されておられます。Raman Center ではセンター長など重要なポストを歴任されましたが、現在は Chair Professor としてご自身の研究に専念され、世界的なご研究を展開されています。

Mukherjee 教授のご研究は理論化学の広い分野をカバーしています。電子状態理論、量子ダイナミクス、多体系の統計力学などを研究されていますが、特に、多配置クラスター展開法 (multi-reference coupled cluster theory) のパイオニアであり、多配置クラスター展開法の開発において、世界をリードするご研究をされています。また、クラスター展開法に基づく励起状態の理論として、線形応答クラスター展開法 (coupled cluster linear response theory) を発表されており、励起状態理論においても重要なご研究をされています。

クラスター展開法は分子の電子状態を効率よく精密に記述する理論であり、近年の *ab initio* 法では CCSD(T) が信頼性の高い理論として認識されてい

ますが、この方法は単配置 (Hartree-Fock) を参照関数としており、分子の結合解離や擬縮退の電子状態などには適用できないことが知られています。Mukherjee 教授は、このような記述が難しい電子状態にも応用できる多配置クラスター展開法を開発されています。特に、目的の状態のみをターゲットにする方法が様々な系で有用であることが示されており、この方法は Mukherjee 教授にちなんで M_kMRCC 法として世界的に利用されています。

Mukherjee 教授は、日本にも度々訪れておられ、JSPS 外国人研究者招へい事業で京都大学に滞在されたこともあります。また、日本国内に広い分野の沢山のご友人がおられ、分子研に来られることをとても楽しみにしておられます。量子化学だけでなく広い分野の見識をもっておられ、研究を深く理解し、議論をしていただけます。分子研に滞在される時には、皆さんのご研究について議論をしていただき、研究交流をしていただけたらと思います。

(江原 正博 記)