

## 第64回 岡崎コンファレンス

---

次世代の分子軌道法

(Molecular Orbital Theory for the New Millennium)

開催日 平成12年1月20日～22日

提案代表者	名古屋大学情報文化学部	天能 精一郎
	東京大学大学院工学系研究科	中野 晴之
	京都大学大学院工学研究科	波田 雅彦

招待外国人講演者

LINDH, Roland	(University of Lund, Sweden)
HARRISON, Robert J.	(Pacific Northwest National Laboratory, USA)
MUKHERJEE, Debashis	(Indian Association for the Cultivation of Science, India)
HEAD-GORDON, Martin	(University of California, Berkeley, USA)
NOGA, Jozef	(Slovak Academy of Sciences, Slovakia)
KOCH, Henrik	(University of Southern Denmark, Odense, Denmark)
JENSEN, Jan H.	(University of Iowa, USA)
LEE, Yoon S.	(KAIST, South Korea)
HESS, Bernd A.	(Univrsitaet Erlangen, Germany)

理論化学の大きな飛躍は常に新しい概念や方法論の発展と緊密にリンクしている。電子計算機の高速化に伴う斬新な方法論の出現により、分子軌道法に代表される理論化学は新しい次元を迎えたと言っても良い。分子軌道理論の分野では最近10年間、次のトピックスで特筆すべき理論の進歩が見られた。大規模分子を高速に計算するためのスケーラブルな分子軌道理論、密度行列を変分パラメータとする新しい分子軌道理論、励起状態や化学反応といった擬縮重条件下での高精度計算を達成する多参照多電子理論、実験誤差内の高い計算精度を可能にする完全基底関数の多電子理論、溶媒分子や不活性ペプチド鎖を精密なポテンシャルとして取り扱うための理論、相対論を取り入れた分子軌道理論。本岡崎コンファレンスは、新しい千年期を迎えるにあたり、そのような新しい方向性を作り出す事に貢献してきた先進の量子化学者を迎え、スケーリングと多参照理論を中心に、分子軌道理論の更なる方向性を議論した。

## 第65回 岡崎コンファレンス

---

ナノストラクチャー創製における放射光の果たす役割

( Advantages of utilization of SR in nano-structure creation )

開催日 平成12年1月27日～29日

提案代表者 分子科学研究所

宇理須 恆 雄

分子科学研究所

黒 澤 宏

招待外国人講演者

BACHER, Walter (Forschungszentrum Karlsruhe, Germany)

BERMUDEZ, Victor M. (Naval Research Laboratory, USA)

GRAY, Struan M. (Lund University, Sweden)

JO, Sam K. (Kyung Won University, Korea)

SCHWENTNER, Nikolaus (Freie Universitaet, Germany)

URQUART, Stephen G. (University of Saskatoon, Canada)

WEAVER, John H. (University of Illinois at Urbana-Campaign, USA)

量子効果を利用した新機能性発現デバイスとして注目を集めているナノストラクチャーであるが、サイズ並びに配向などを精密に制御する技術の開発が遅れており、必ずしもナノストラクチャー本来の性能を発揮できるにいたっていないのが現状である。理想的なナノストラクチャー創製には表面反応の分子レベルでの観測と制御が不可欠であり、そのためには放射光科学といった従来にはない新しい科学にもとづく技術の開発が重要となる。本コンファレンスでは、分子レベルで構造および、配向を制御したナノストラクチャー創製に深い関心を持つ表面科学、固体物理、半導体材料・プロセスなどの異なる専門分野の研究者が集まり、表面における光励起反応、ナノストラクチャーの作成方法および評価方法などについて討論を行い、ナノストラクチャーの作成と評価におけるシンクロトロン放射光の果たす役割に重点を置き、今後の放射光利用の新しい視点を模索した。