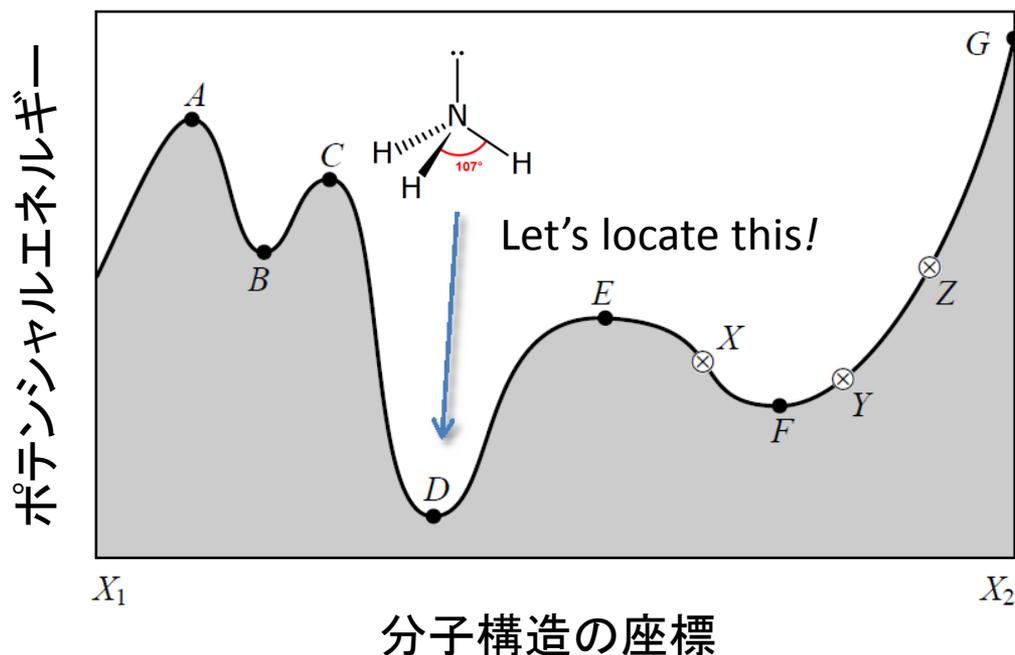


体験入学プログラム 「計算化学のハッキング体験学習」

理論計算領域・柳井グループ



分子の安定構造を探ろう

- 分子の最適化構造
 - 分子の構造変化に対する、エネルギー安定構造
- 最適化構造を探索するアルゴリズムの実装を体験
 - 量子化学計算でポテンシャルエネルギー計算
 - 二原子分子の安定結合長
 - 安定構造を探索するアルゴリズムの学習と、
実際のコンピュータプログラミング
 - 分割探索法・最急降下法・共役勾配法・Newton法
 - 多原子分子への応用