上余白 25 mm

「講演番号」を左上隅に記入します。

講 演 題 目

(所 属) ○講 演 者、共 同 研 究 者

「講演番号」は、分子構造総合討論会ホームページ
http://www2.tky.3web.ne.jp/~bkinfo/
に、掲示されているプログラムで確認してください。
※「講演番号」は、発表登録システムで使われている「予備登録番号」ではありません。 **(フォント指定：Arial あるいはゴシック 14pt)**

左余白 25 mm

右余白 25 mm

本文

A4 版 1 枚

使用するフォント、図表に関しては特に指定はしません。

下余白 25 mm

予稿例

2p021

基底・励起状態におけるポテンシャルエネルギー曲面に対する相対論的研究

(東大院工) ○中嶋隆人、平尾公彦

【序】TlH,及び Tl_2 分子は相対論的効果を研究する上で非常に興味深い系である。本研究ではこれらの分子の基底・励起状態に対し、相対論的効果を考慮したポテンシャルエネルギー曲線を計算した。電子相関法として、CASSCF/MRMP 法を用い、定量的に電子相関を考慮した。スピン-軌道相互作用は励起状態に対し、非常に重要であることが示された。

【方法】

【結論】

おわり