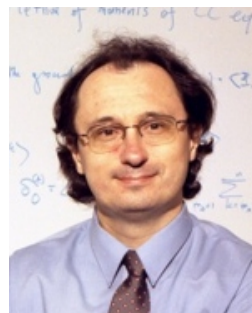


Renormalized and Active-Space Coupled-Cluster Methods: Key Concepts and Recent Advances

Professor Piotr Piecuch (Department of Chemistry, Michigan State University, USA)



2013年3月19日(火) 10:30–12:00

(創成科学研究棟4階セミナー室A)

<http://www.cat.hokudai.ac.jp/access.html>

Accurate modeling of chemical reactions and photochemistry requires a balanced treatment of dynamical and non-dynamical many-electron correlation effects. The popular single-reference coupled-cluster (CC) and equation-of-motion CC (EOMCC) methods, such as CCSD (T) and EOMCCSD, capture the former effects very effectively, but have difficulties with the latter ones, whereas multi-reference CC theories that are supposed to capture both types of correlations continue facing unresolved problems. This talk will discuss pragmatic ways of addressing this situation via the completely renormalized and active-space CC and EOMCC theories, and their recent merger via the novel CC (P;Q) formalism, which reproduces the nearly exact relative and total electronic energies at the small fraction of the computer cost of other methods that aim at similar accuracies. The development of the singly and doubly ionized and electron-attached variants of the active-space EOMCC methodology, which provide an excellent description of electronic excitations in radicals and biradicals, will be addressed, too.

問合せ先: 触媒化学研究センター・長谷川淳也 (hasegawa@cat.hokudai.ac.jp / 011-706-9145)

電子状態理論の第一人者である Piotr Piecuch 教授(ミシガン州立大学)による講演会を開催します。Piecuch 教授は高精度電子状態理論の開発に顕著な業績があり、Coupled-Cluster(CC)法を発展させて、結合解離系、開殻電子系、励起状態への応用を可能とした一連の研究は国際的に極めて高く評価されています。計算プログラムの一部は GAMESS にも導入されています。また、同方法を化学反応ポテンシャル面、分子間相互作用、分子物性などへの応用に向け積極的に研究展開されています。

本日は、基礎的な内容を含めるために、2 部構成で講演いただくことになりました。第 1 部では、高精度電子状態理論に関して、第 2 部では大規模分子系に応用できる CC 法の開発と化学反応への応用について講演いただきます。来聴、歓迎いたします。