

# 平成 28 年度森野レクチャーのご案内

平成 28 年度分子科学研究奨励森野基金の援助により、下記の要領で、台湾国立交通大学の Chaoyuan Zhu 教授の森野レクチャーを開催する運びとなりました。森野基金は、故森野米三東京大学名誉教授が分子科学の一層の発展に寄与することを目的として設立された基金で、その事業の一環として毎年優れた外国人研究者を招聘しています。ご多用中とは存じますが、皆さまのご参加をお待ちしております。また、レクチャー終了後、懇親会を開催いたします。森野先生の御遺志で、若い方々が講演者との交流を得る機会を設けることも目的のひとつですので、こちらにも是非ご参加ください。

森野レクチャーと懇親会の参加は、ともに無料です。当日飛び入りのご参加も大歓迎いたしますが、もし参加をご予定頂けるようでしたら、運営の都合上、できるだけ事前申込をいただきますようご協力を何卒宜しくお願い申し上げます。なお、キャンセル連絡は一切不要です。

\*\*\*\*\* 平成 28 年度森野レクチャー \*\*\*\*\*

講師：Chaoyuan Zhu 教授（台湾国立交通大学）

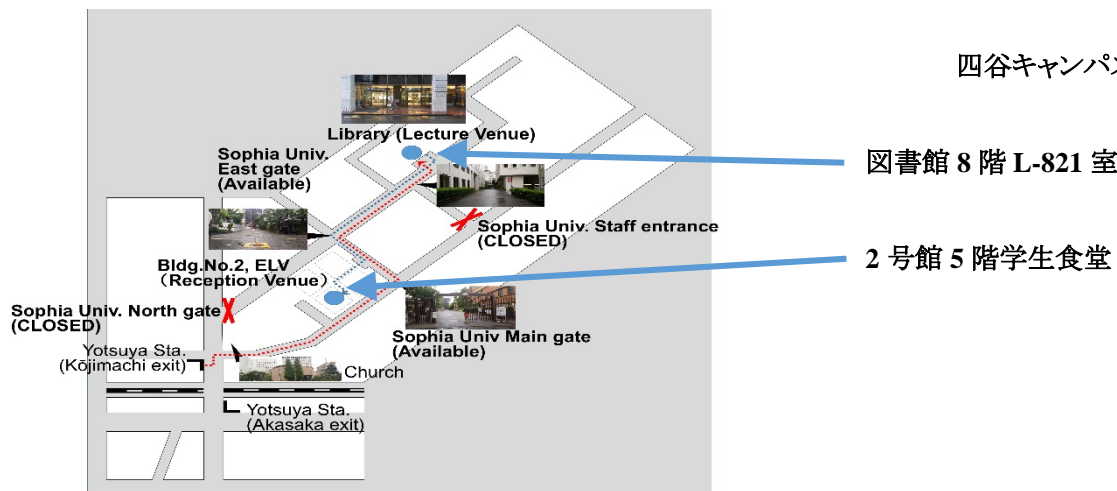
講演題目：“Theory and simulation of the excited-state molecular reaction dynamics and electronic spectroscopy”

講演要旨：Born-Oppenheimer approximation is an important tool for solving Schrödinger equations and results in ground electronic state, on which transition state plays an important role for chemical reactions. However, chemical reactions induced by photo-exciting molecule to electronically excited states are mostly governed by conical intersections and intersystem crossings. Infrared molecular spectroscopy arises from vibrational motion on the same electronic state, while UV-visible molecular spectroscopy arises from vibronic transition between different electronic states. The simple and accurate theoretical method to compute nonadiabatic switching probability is essential for large-scale on-the-fly trajectory surface hopping molecular dynamics. Franck-Condon factors corrected by simple and accurate algorithm is key to improve molecular spectroscopy simulation in both gas and solution phases. Various real-system simulations in comparison with experimental observations are demonstrated with the present theoretical methods.

日時・場所：6月18日(土)13:30～(受付12:30から)

上智大学四谷キャンパス内図書館 L-821 室（参加費無料）

四谷キャンパスマップ



懇親会：6月18日(土)15:30～17:30

上智大学 2 号館 5 階学生食堂（参加費無料）

主催：公益法人分子科学研究奨励森野基金

事前参加登録：可能でしたら、6月6日(月)までに、氏名、所属、身分の情報を添えて、メールによる事前申込をお願い申し上げます。宛先は [masahiko@tagen.tohoku.ac.jp](mailto:masahiko@tagen.tohoku.ac.jp) です。なお、キャンセル連絡は一切不要です。また、当日飛び入りのご参加も大歓迎いたします。

例) 東京太郎(東大、東大名誉教授)、大阪次郎(阪大、准教授)、名古屋三郎(名古屋大、M2 学生)

問合せ先: 高橋正彦(東北大多元研)

TEL: 022-217-5386 or 5385 Email: [masahiko@tagen.tohoku.ac.jp](mailto:masahiko@tagen.tohoku.ac.jp)

南部伸孝(上智大理工; 現地世話人)

TEL: 03-3238-3475 Email: [shinkoh.nanbu@sophia.ac.jp](mailto:shinkoh.nanbu@sophia.ac.jp)

Website: <http://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/takahashi-m/>

[http://pweb.sophia.ac.jp/nanbu\\_lab/index.html](http://pweb.sophia.ac.jp/nanbu_lab/index.html)

Zhu 教授の講演予定を一覧にして下記にご案内致します。

[1] 第 32 回化学反応討論会招待講演 (<http://sckd.jp/32saitama/>)

現地世話人: 高柳敏幸(埼玉大理)

日時・場所: 6/1(水) 16:50-、大宮ソニックシティ

講演題目: Simple and accurate nonadiabatic switching probability for trajectory-based non-Born-Oppenheimer molecular dynamics simulations

[2] 京都大学

現地世話人: 鈴木俊法(京大院理)

日時・場所: 6/6(月) 10:00-、京都大学理学部 6 号館 571 会議室

講演題目: Global-switching trajectory surface-hopping algorithm for conical intersections and intersystem crossings: Triplet-state branched intramolecular proton transfer for o-nitrophenol

[3] 広島大学

現地世話人: 山崎勝義(広島大院理)

日時・場所: 6/9(木) 15:00-、理学研究科 B301 室

講演題目: Anharmonic and damping correction on Franck-Condon factors with application to molecular electronic spectroscopy

[4] 分子研コロキウム

現地世話人: 斉藤真司(分子研)

日時・場所: 6/15(水) 16:00-、分子科学研究所研究棟 2 階 201 号室

講演題目: Theoretical aspects of the molecular dynamics and spectroscopy involving in electronically excited states

[5] 森野レクチャー

現地世話人: 南部伸孝(上智大理工)

日時・場所: 6/18(土) 13:30-、上智大学四谷キャンパス内図書館 L-821 室

講演題目: Theory and simulation of the excited-state molecular reaction dynamics and electronic spectroscopy

[6] 理化学研究所(和光)

現地世話人: 中村振一郎(理研)

日時・場所: 6/20(月) 15:00-、Small meeting room 1 (West), Welfare and Conference Building

講演題目: Trajectory-based nonadiabatic molecular dynamic simulations and its application to photochemical reaction

[7] 筑波大学

現地世話人: 重田育照(筑波大学)

日時・場所: 6/22(水) 15:00-、計算科学研究センターワークショップ室

講演題目: Multi-state ab initio on-the-fly trajectory surface-hopping molecular dynamic simulation for azobenzene photoisomerization

[8] 東北大学

現地世話人:高橋正彦(東北大多元研)

日時・場所:6/24(金)16:00-、多元研西2号館(科研N棟)3Fセミナー室(N313-315)

講演題目:Theory and simulation of the excited-state molecular dynamics and spectroscopy

[9] 北海道大学

現地世話人:武次徹也(北大院理)

日時・場所:6/27(月)15:00-、北海道大学理学部7号館2-219室

講演題目:Global-switching trajectory surface-hopping algorithm for conical intersections and intersystem crossings  
with its application to photochemistry