

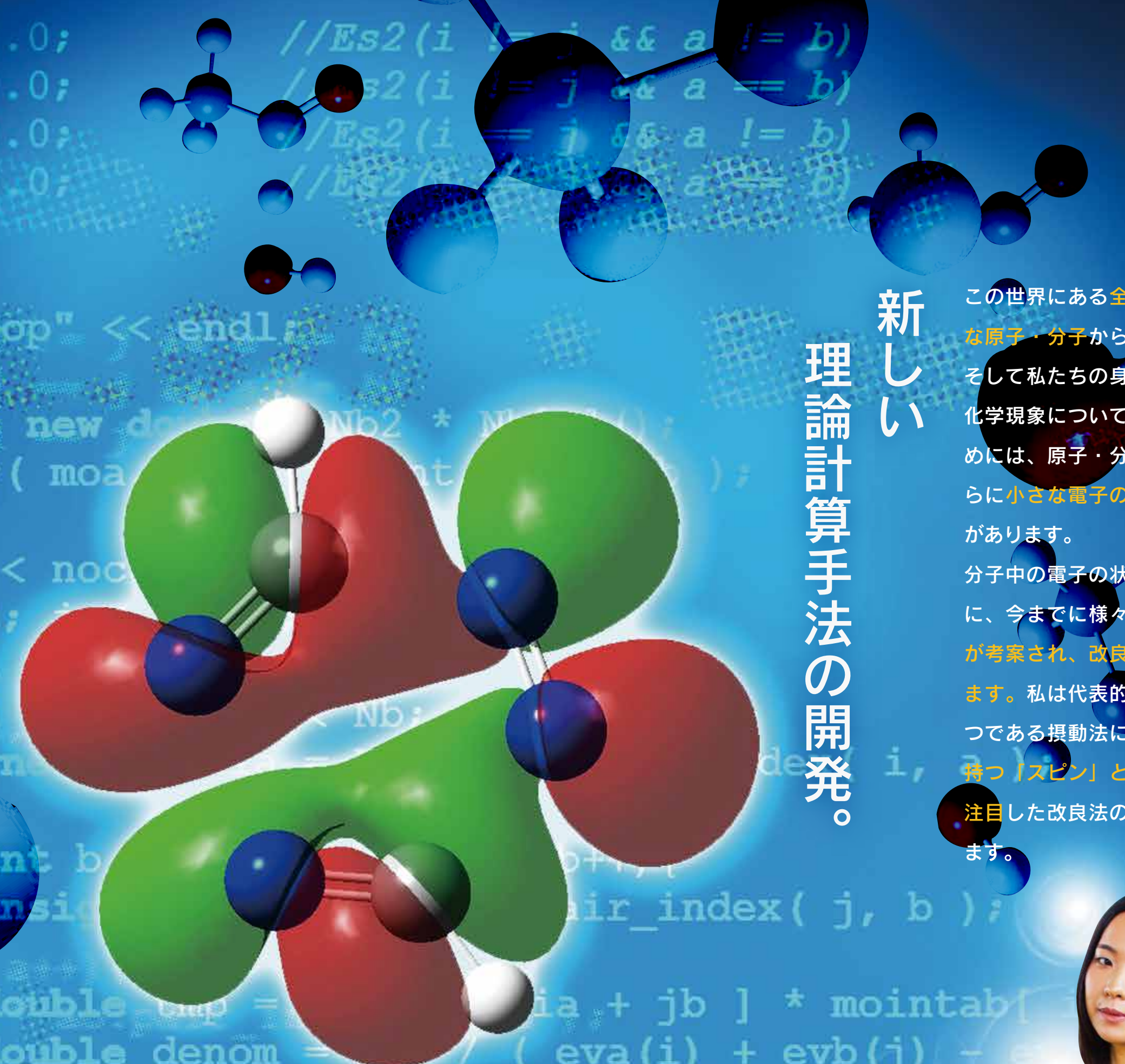
TITLE.

分子の世界。

理論が描く

World of molecules

BEAUTY IN SCIENCE TECHNOLOGY AND ENGINEERING



新しい

理論計算手法の開発。

この世界にある全てのものは小さな原子・分子からできています。そして私たちの身の回りで起こる化学現象について深く理解するためには、原子・分子の中にあるさらに小さな電子の様子を知る必要があります。

分子中の電子の状態を求めるために、今までに様々な理論計算手法が考案され、改良が重ねられています。私は代表的な計算手法の一つである摂動法に対して、電子の持つ「スピン」と呼ばれる性質に注目した改良法を開発を行っています。



金沢大学：自然科学研究科 物質化学専攻

理論化学

西田 愛美

NISHIDA MANAMI



計算用コンピュータ
[DELL PRECISION TOWER]