

口頭発表

A. 招待講演

H. Nakatsuji, “SAC-CI Theory: From Fine Spectroscopy to Molecular Biology”, Trends in Theoretical Chemistry 2002, Indian Association for the Cultivation of Science, Kolkata, India, (January 17-19, 2003), Invited talk.

H. Nakatsuji, “Professor Byendu M. Deb on the Occasion of His 60th Birthday”, Trends in Theoretical Chemistry 2002, Indian Association for the Cultivation of Science, Kolkata, India, (January 17-19, 2003), Invited talk.

H. Nakatsuji, “SAC-CI Theory: From Fine Spectroscopy to Molecular Biology”, 10th Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical/Computational Chemistry, Pohang University of Science and Technology, Korea, (January 12-15, 2003), Invited talk.

S. Sakaki, “C-H σ -Bond Activation and Related Reaction by Transition Metal Complexes: Theoretical Study”, 10th Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical/Computational Chemistry, Pohang University of Science and Technology, Korea, (January 12-15, 2003), Invited talk.

S. Sakaki, “Theoretical Study of Complicated Reactions: From Detailed Calculations to Essence”, Gratama Workshop, Utrecht, Netherlands, (May 12-15, 2003), Plenary talk.

H. Nakatsuji, “Quantum Principles in Chemistry – Deepening and Realization”, Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2004), Gyeongju, Korea, (February 15-20, 2004), Invited talk.

M. Ehara, J. Hasegawa, H. Nakatsuji, “Fine theoretical spectroscopy with SAC-CI method”, Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2004), Gyeongju, Korea, (February 15-20, 2004), Contributed talk.

B. その他の研究集会

中辻、「Inverse Schrodinger equation and the exact wave function」、第8回理論化学討論会（2002年5月、大阪）

江原、中辻、「Structure of the exact wave function. ICI applied to molecular Schrodinger equation」、第8回理論化学討論会（2002年5月、大阪）

石村、福田、波田、中辻、「相対論的電子相関理論による NMR 化学シフトの計算(2): HX(X=F, Cl, Br, I), H₂X(X=O, S, Se, Te)の H-1 化学シフト、CH₃X(X=F, Cl, Br, I)の C-13 化学シフト」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

大八木、石村、福田、波田、中辻、「相対論的電子相関理論による NMR 化学シフトの計算(3): H₂X(X=O, S, Se, Te)の核磁気遮蔽定数」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

野々川、福田、波田、中辻、「相対論的電子相関理論による NMR 化学シフトの計算(4): Mo, Tc, W, Re 酸化物の O-17 化学シフト」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

大宮、加藤、「溶媒和反応経路ハミルトニアンモデルの Menshtkin 反応への応用」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

高田、長谷川、根矢、中辻、「Distorted porphyrin 類の励起状態 : SAC-CI study」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

中田、江原、中辻、「アジン類の価電子イオン化スペクトルに関する研究」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

倉本、江原、中辻、「金属表面吸着分子の光電子スペクトルに関する理論的研究」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

中嶋、長谷川、中辻、「ヘモグロビンにおける酸素の可逆的な結合に関する研究」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

福田、波田、中辻、「Douglas-Kroll 変換の磁場下への理論の拡張と、重原子を含む系の核磁気遮蔽定数に対する相対論的効果」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

波田、石村、大八木、野々川、福田、中辻、「相対論的電子相関理論による NMR 化学シフトの計算(1)」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

大塚、長谷川、中辻、「MEG4/EX-MEG4 法による分子の励起・イオン化状態の理論的研究」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

宮原、長谷川、中辻、大須賀、荒谷、津田、「SAC/SAC-CI 法による directly linked zinc porphyrindimer の励起状態の理論的研究」、第 8 回理論化学討論会 (2002 年 5 月、大阪)

