

# 10th Symposium on Electronic Structure Theory

## 第10回 電子状態理論シンポジウム

～光機能に潜む化学原理の解明～

2024年

11月6日(水) 12:30 開場

会場 ▶ 早稲田大学 西早稲田キャンパス  
62W号館 1階大会議室 A・B

主催 ▶ 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 中井研究室  
(理工総研プロジェクト『計算化学の社会実装』)

共催 ▶ 早稲田大学 理工学術院総合研究所

### プログラム

13:00 - 13:40

開会の挨拶、講演01 中井浩巳 (早稲田大学)  
「理論化学による光機能に潜む化学原理の解明」

13:40 - 14:30

招待講演I1 阿部竜 (京都大学)  
「高効率太陽光水分解実現に向けた可視光応答型半導体光触媒の設計・開発」

14:30 - 15:20

ポスターセッション・コーヒープレイク

15:20 - 16:10

招待講演I2 石井あゆみ (早稲田大学)  
「光とスピンを捉える有機無機ハイブリッド次元らせん材料」

16:10 - 17:00

招待講演I3 恩田健 (九州大学)  
「時間分解赤外分光と量子化学計算による光機能性材料の動的構造解析」

17:00 - 17:10

おわりに

17:10 - 17:20

写真撮影

17:30 - 18:30

意見交換会



参加登録はこちら ▶



$$\Delta E^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{i,j}^{(occ)} \sum_{a,b}^{(vir)} \frac{g_{ij} g_{ab}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_a - \epsilon_b}$$
$$\Psi = E\Psi$$