

## 「基底・励起状態における重原子分子の相対論的效果」

講演者氏名	中嶋隆人
所属	東京大学大学院工学系研究科応用化学科
講演タイトル	「基底・励起状態における重原子分子の相対論的效果」
講演概略	最近我々は、重原子分子に対し相対論的效果を考慮するため、計算コストの高い Dirac方程式を解く代わりに、Dirac方程式の持つsmall成分を消去することにより、RESC(relativistic scheme by eliminating small components)法と呼ぶ新しい相対論的電子状態理論を開発した。この方法は、容易に既存の非相対論的電子

