

佐藤 啓文 (さとう ひろふみ)



京都大学工学研究科分子工学専攻 准教授

【E-mail】 [hirofumi@moleng.kyoto-u.ac.jp](mailto:hirofumi@moleng.kyoto-u.ac.jp)

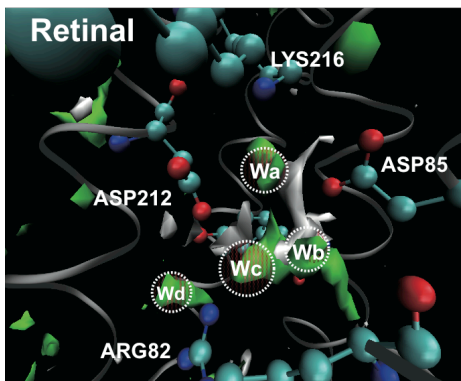
【専門】 理論化学

【キーワード】 分子性統計力学 水素結合ネットワーク

【公募研究課題名】 プロトン・水素結合と生体分子の理論化学

〈研究グループアクティビティー〉

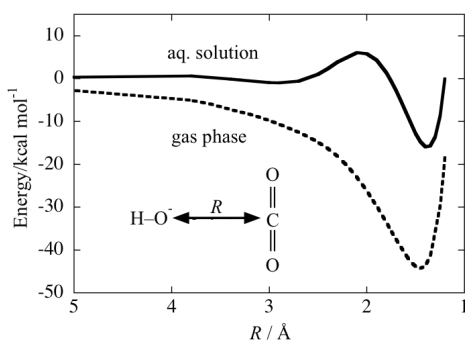
分子性液体のための積分方程式理論 (統計力学理論) の開発と応用



分子の電子状態を解析するための量子化学的手法の開発と応用

$$A^{-}B^{+} : \sum_{\mu \in A} \sum_{\nu \in A} \langle \phi_i | \chi_{\nu}^{\sigma_1^{+}} \chi_{\mu}^{\sigma_2^{+}} \varphi_{\nu}^{\sigma_2^{-}} \varphi_{\mu}^{\sigma_1^{-}} | \phi_i \rangle,$$
$$A - B : 2 \sum_{\mu \in A} \sum_{\nu \in B} \langle \phi_i | \chi_{\nu}^{\sigma_1^{+}} \chi_{\mu}^{\sigma_2^{+}} \varphi_{\nu}^{\sigma_2^{-}} \varphi_{\mu}^{\sigma_1^{-}} | \phi_i \rangle,$$
$$A^{+}B^{-} : \sum_{\mu \in B} \sum_{\nu \in B} \langle \phi_i | \chi_{\nu}^{\sigma_1^{+}} \chi_{\mu}^{\sigma_2^{+}} \varphi_{\nu}^{\sigma_2^{-}} \varphi_{\mu}^{\sigma_1^{-}} | \phi_i \rangle,$$

溶液内化学反応・化学過程のための新規理論の開発と応用と応用



イオン液体の構造とそれを媒体とする反応の理論解析

