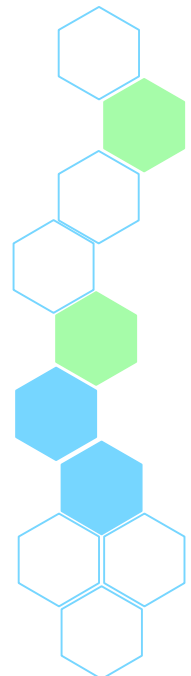
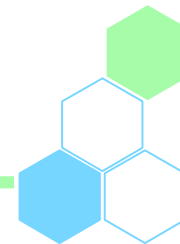


永瀬グループ

研究室 & 体験入学紹介

2005年8月2日
第2回 夏の体験入学





分子科学研究所 理論分子科学研究系

専門: 理論化学・計算化学

理論化学とは？

理論的モデルや数式をもとに分子の性質を理解する

量子力学・**量子化学**・統計力学・計算化学

量子化学でできること

化学結合・分子構造・化学反応・分子間相互作用など

化学のあらゆる問題を電子レベルで厳密に取り扱えられる

研究目的

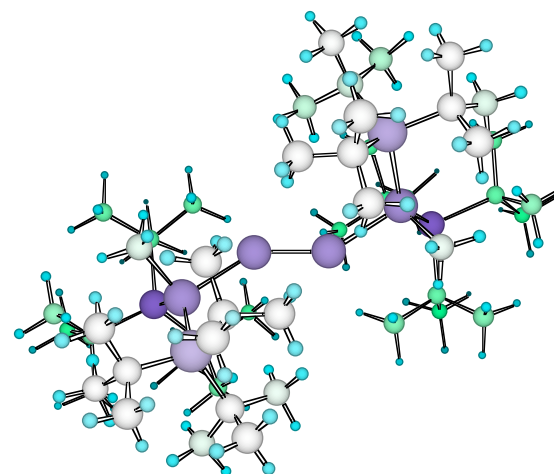


「新しい構造、物性、機能をもつナノ分子を、量子化学計算に基づいて設計して解析する手法を確立し、ナノ材料への応用を展開する」

- *望む構造、物性、機能をもつ分子やクラスターの設計
- *大規模・高精度の計算手法の開発

具体的な研究例

1. 高周期元素間の多重結合

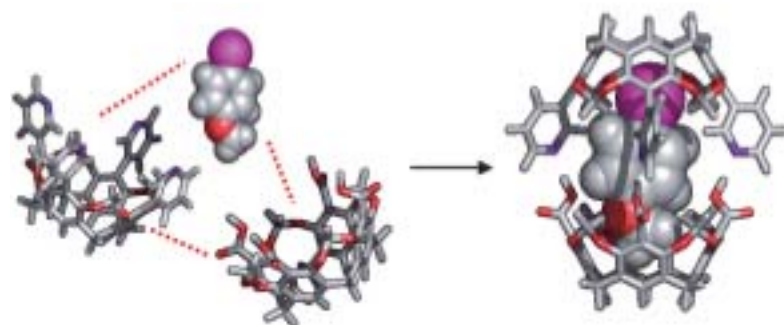


望む構造の設計

具体的な研究例

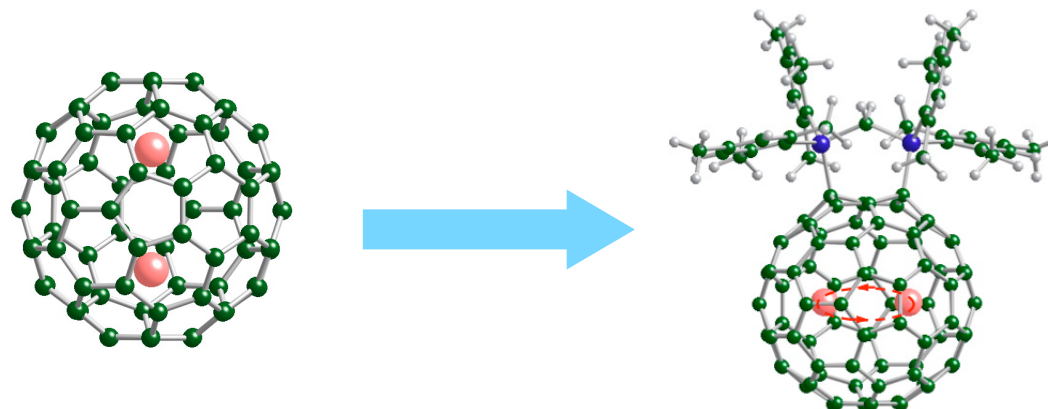


2. 自己集合とカプセル化



ドラッグデリバリーへの応用

3. 化学修飾による回転運動の制御



内部金属の3次元的回転

2次元的回転

新しい機能性分子の設計

体験入学のプログラム



1. 量子化学の基礎にふれる

簡単な分子軌道法を用いて、小さな分子を実際に自分の手を動かして計算してみる。

計算プログラムの中身はどうなっている？

2. 実際にプログラムを使ってみる

量子化学計算からどんなことがわかるのか

3. 最前線のトピック

最近の理論化学のトピックについて、興味にそってお話します