永瀬グループ
研究室＆体験入学紹介

2006年8月7日

第3回　夏の体験入学

永瀬グループ

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？

古典力学・量子力学・統計力学などの理論を基礎として、
物質の性質・構造や化学反応を理解する

実験化学によって測定が困難な状態にも応用可能

原子・分子のスケール ➡ 量子力学に基づく化学（量子化学）

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の
問題を正確に取り扱える

研究目的

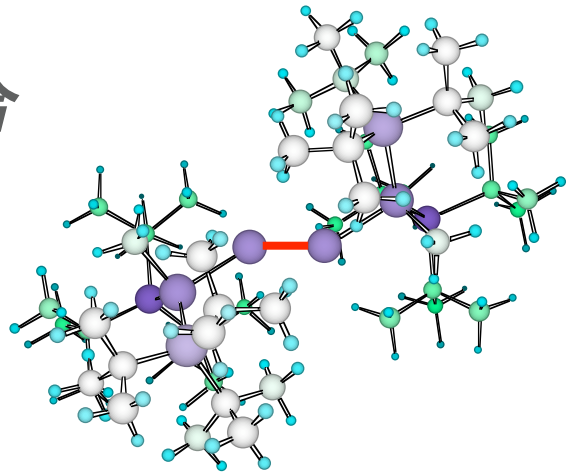
「新しい構造、物性、機能をもつナノ分子を、量子化学計算に基づいて設計して解析を行い、ナノ材料への応用を展開する」

***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

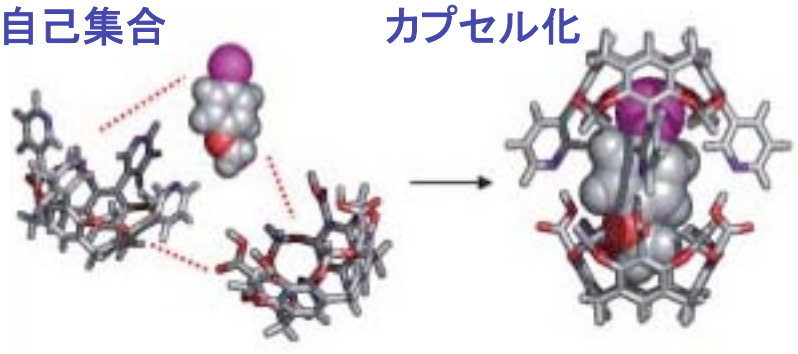


望む構造の設計

●：ケイ素

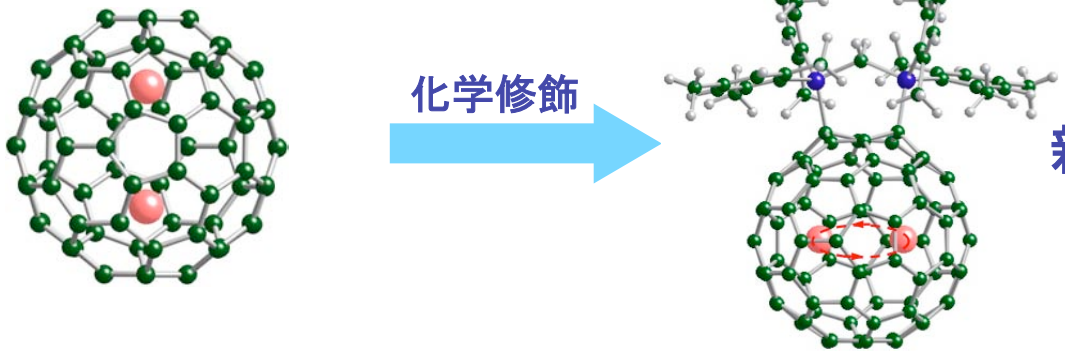
具体的な研究例

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



フラーレン内部金属の
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

分子軌道法など量子化学で用いられる代表的な方法論の簡単な説明

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

最新の理論化学のトピックについて、興味にそってお話しします