

分子間相互作用理論と その分子クラスターへの応用

(財)豊田理化学研究所
フェロー 岩田 末廣

目的

分子の骨格は、原子が共有結合によって結びつけられて作られている。共有結合をしていない原子間も弱い相互作用をしている。この相互作用エネルギーを量子力学の第1原理から精度よくかつ実用的な計算を可能とする理論と計算プログラムを開発する。

方法

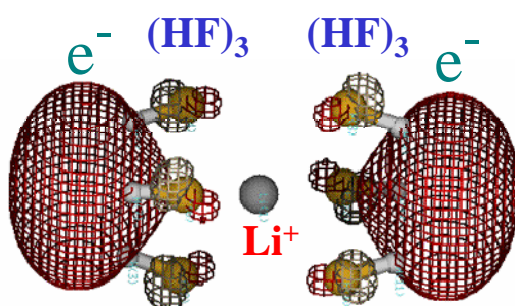
電子計算機を駆使して、量子力学の基本方程式「シュレディンガー方程式」を近似的に解く。デスクトップやノート型のマッキントッシュを、プログラムの開発だけでなく、小規模分子クラスターの研究にも活用する。大規模な計算には、スーパーコンピュータも利用する。

期待する結果

精度よくかつ高速計算を実現することによって、統計力学的手法の併用を可能にし、弱く相互作用している原子や分子の集合体の構造や化学反応に対する「温度」効果を調べることができる。たとえば、

- 1) 水分子の集合体
 - 2) 沢山の水分子に囲まれた有機分子や金属原子
 - 3) 実験的にまだ合成されていない分子集合体
- などの熱的安定性や反応性を計算化学で解明する。

実験的にはまだ知られていないLiと6個のHF分子集合体の負イオン。Liはイオンになっている。



水分子8量体の
予想される構造

