

ポテンシャル表面解析法の開発と応用

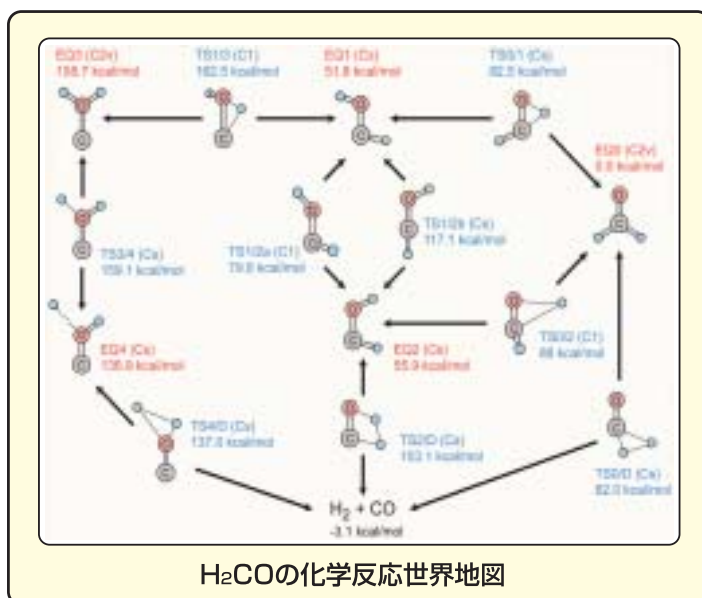
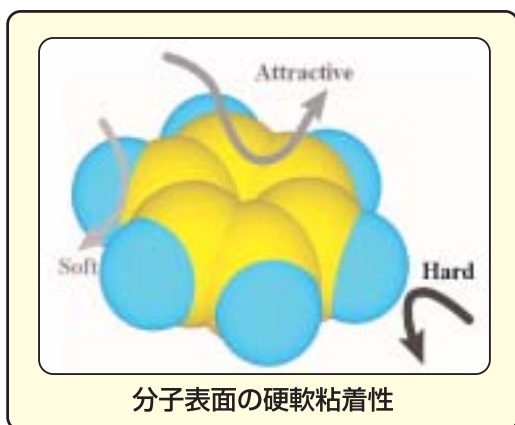
(財)豊田理化学研究所
フェロー 大野 公一

目的

原子の集合系の構造・反応・物性は、ポテンシャル表面の特徴に支配されている。本研究では、ポテンシャル表面を解析する方法を開発し、新しい理論及び実験に基づいて、新現象・新素材の発掘を進める基礎を築くとともに、その応用を展開する。

方法

- 量子化学計算に基づく従来の非調和振動解析は、ポテンシャル表面情報のサンプリングが非効率なため、実用的でない。本研究では、非調和性の大きい方向を超球面探索法で求めることにより、著しく効率的かつ高精度な非調和振動解析を実現する。
- 原子分子間の接触・衝突の場である分子表面の特性は、諸物性解明に重要であるが未解明な点が多い。本研究では、原子をプローブとして使用し、分子表面特性を明らかにする。
- 個々の化学組成に可能な全異性体とそれらを結ぶ全反応経路の解明は、化学の基本問題であるが、これまでほとんど明らかにされていない。本研究では、ポテンシャルの非調和下方歪みに着目する反応経路探索法を開発し、化学の基本問題を解明する。



期待される成果

- 高精度非調和振動解析法の開発
- 分子表面の概念構築と特性評価法の確立
- 化学反応世界地図自動探索法の開発