



講演会のご案内

## ノートパソコン分子モデリング「分子会合系の量子化学」

日時：2019年4月8日（月），午前10時～午後4時

場所：大阪大学産業科学研究所 講堂

今からおよそ90年前，物理学者 Dirac は「全ての物理・化学には数理学理論が不可欠であるが，最近その物理基本法則（量子力学）が明らかになった。しかし，それら法則（量子力学）の適用には数理方程式(Schrödinger Equation)の正確な解を求めることになるが，それが現時点では極めて困難である」と述べられています。単分子系の計算は実験科学者が実験を行う要領でノートパソコンを用いて行うことができる時代に到達しています。しかし，最近では大量の情報・計算を高速処理できるコンピュータの画期的進展があつて，分子会合系の量子化学計算を可能にした密度汎関数理論に基づく分子モデリング(DFT/MM)までも行える状況となってきました。分子会合(van der Waals 結合会合)が起点となる化学反応解析，電子デバイスにおける分子界面電子移動解析が精度よく検証・予見できるようになりました。1998年ノーベル化学賞受賞の Pople の1番弟子 Warren Hehre が来阪される機会に，これからの物質・生命化学を拓く「分子会合系の量子化学」をテーマに実験科学者が学べる講演会を開催します。

10:00-12:00 Warren Hehre 「Introduction of “Spartan” Molecular Modeling」

13:00-14:00 森川良忠（大阪大学大学院 工学研究科，教授）

「第一原理電子状態計算による有機/金属界面の研究概要」

有機半導体と金属電極との界面での電子状態、特に電子準位接続は有機デバイスの性能を左右する大きな要因である。界面での電子状態を決める要因について解明する研究において第一原理電子状態計算の役割は大きく、本講演ではこの点について議論する。

14:00-15:00 柳田祥三（大阪大学，名誉教授，(株)M3 研究所）

「アモルファス物質の構造とその検証」

分子モデリングで求めた UV/Vis/IR/FIR スペクトルに基づく，色材の会合と UV/Vis 吸収スペクトル特性，マイクロ波駆動迅速化学反応，アモルファス炭素の構造，等々の検証結果を解説する。

15:00-16:00 都築誠二（産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター，上級主任研究員）

「パソコンを使った分子間相互作用エネルギーの解析」

Ab initio 分子軌道法、分散力補正 DFT 法を用いた分子間相互作用エネルギーの計算と結晶中の分子間相互作用の解析等への応用について紹介する。

問い合わせ先 産業科学研究所 家 裕隆 (yutakaie@sanken.osaka-u.ac.jp)