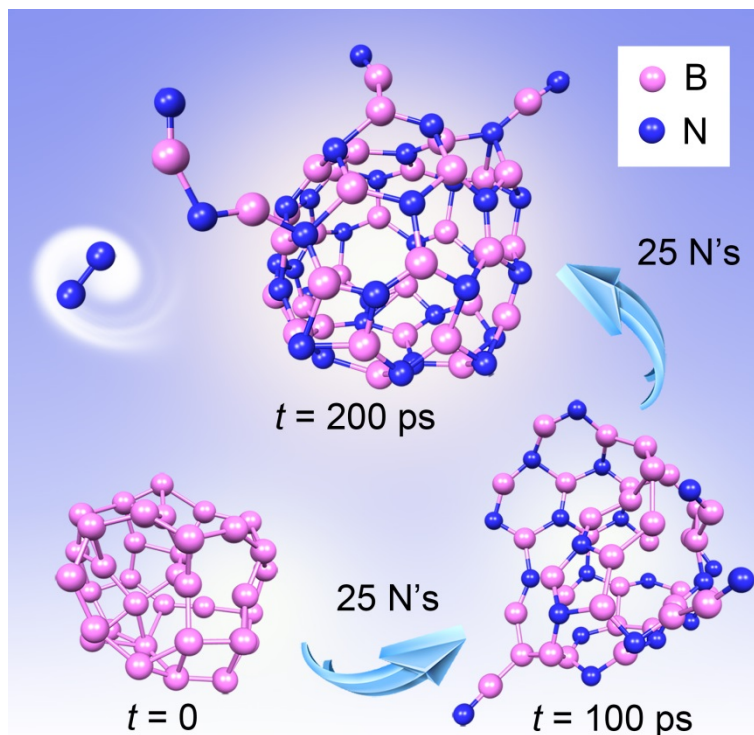


計算科学的手法による複雑多分子系の構造・反応機構の解明及び新しい理論計算法の開発

化学コース 太田 靖人



量子化学分子動力学法によるアモルファス状のホウ素クラスターからの窒化ホウ素フラーレン生成シミュレーション。

私たちの研究室ではナノチューブやフラーレン、グラフェンといった低次元ナノ材料系を主な研究対象としています。これらの物質の秩序立った構造が、秩序性の低い構造や分子集団から自発的に形成されるメカニズム等をコンピュータシミュレーションを通じて解明することを目指しています。シミュレーションでは、量子化学計算と分子動力学法を結合させた量子化学分子動力学法を基軸とし、原子レベルで反応ダイナミクスの実時間追跡を行います。最近の研究としては、窒素とホウ素が交互に結合してできたかご状分子である窒化ホウ素フラーレンの生成機構に関する研究やグラフェン内に存在する格子欠陥の移動機構の解析を、新しい理論計算の開発とともに精力的に行っています。

キーワード：窒化ホウ素フラーレン、グラフェン、量子化学分子動力学、
密度汎関数強結合法