

量子化学と熱力学・速度論・ダイナミクス
～真の理論化学と実験化学の共同研究のために～

講師：中井 浩巳 教授
早稲田大学 先進理工学部
化学・生命化学科



日時：2022年10月19日（水）13:30~14:30

場所：理学部本館 N308 室

共催：物質科学フロンティアを開拓する Ambitious リーダー育成プログラム (ALP)
スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム (SMatS)

要旨：量子化学計算は、いまや化学研究において不可欠のツールとなっている。系統的に高精度化できる波動関数理論や計算精度と計算コストのバランスの良い密度汎関数理論、大規模系を取り扱うための線形スケーリング法、量子化学計算を on-the-fly で用いる非経験的分子動力学法など様々なオプションもあり、研究者は適材適所でそれらを用いることができる。しかし、それらのオプションを用いても実験結果を満足に再現できなかつたり、実験研究に必要な情報を取り出せなかつたりする場合にしばしば遭遇する。本講演では、量子化学と熱力学・速度論・ダイナミクスを関連づけることでこれらの問題を解決した事例を紹介する。

連絡先：理学院化学部門 武次徹也（内線：3535）