

スパコン プロフェSSIONAL

Series Supercomputer Professionals

No.11

日時：平成30年 2月23日（金）
14:00～15:30

場所：金属材料研究所 2号館1階ラウンジ

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

「理論計算による未知触媒開発と 未知反応機構解明」





北海道大学大学院理学研究院

武次 徹也 教授

分子理論の進展と計算機の高速化により実在系分子の電子状態計算が可能となり、計算方法を適切に選べば近似の度合いに応じて実験を再現もしくは予測することができるようになってきた。量子化学計算は既知触媒の機構解明だけでなく、原理的には未知触媒の開発にも貢献できるはずであり、未知触媒材料にいかにして触媒能を賦与するかという観点からのアプローチがあってもよい。我々のグループは元素戦略プロジェクトのもと、これまで触媒として考えられていなかった BN に触媒能を賦与するアイデアを理論計算にもとづき提案し、実験グループがそれを実証することに成功した。この一連の研究を紹介し、材料開発における理論計算の果たす役割を議論したい。時間が許せば、未知反応機構解明を可能にする反応経路自動探索法の研究例についても紹介する。

■ 主催  計算材料学センター

■ 協賛  計算物質科学
人材育成コンソーシアム

 ポスト「京」萌芽的課題
「基礎科学の挑戦」

■ お問合せ 計算材料学センター TEL: 022-215-2411 E-mail: ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp