

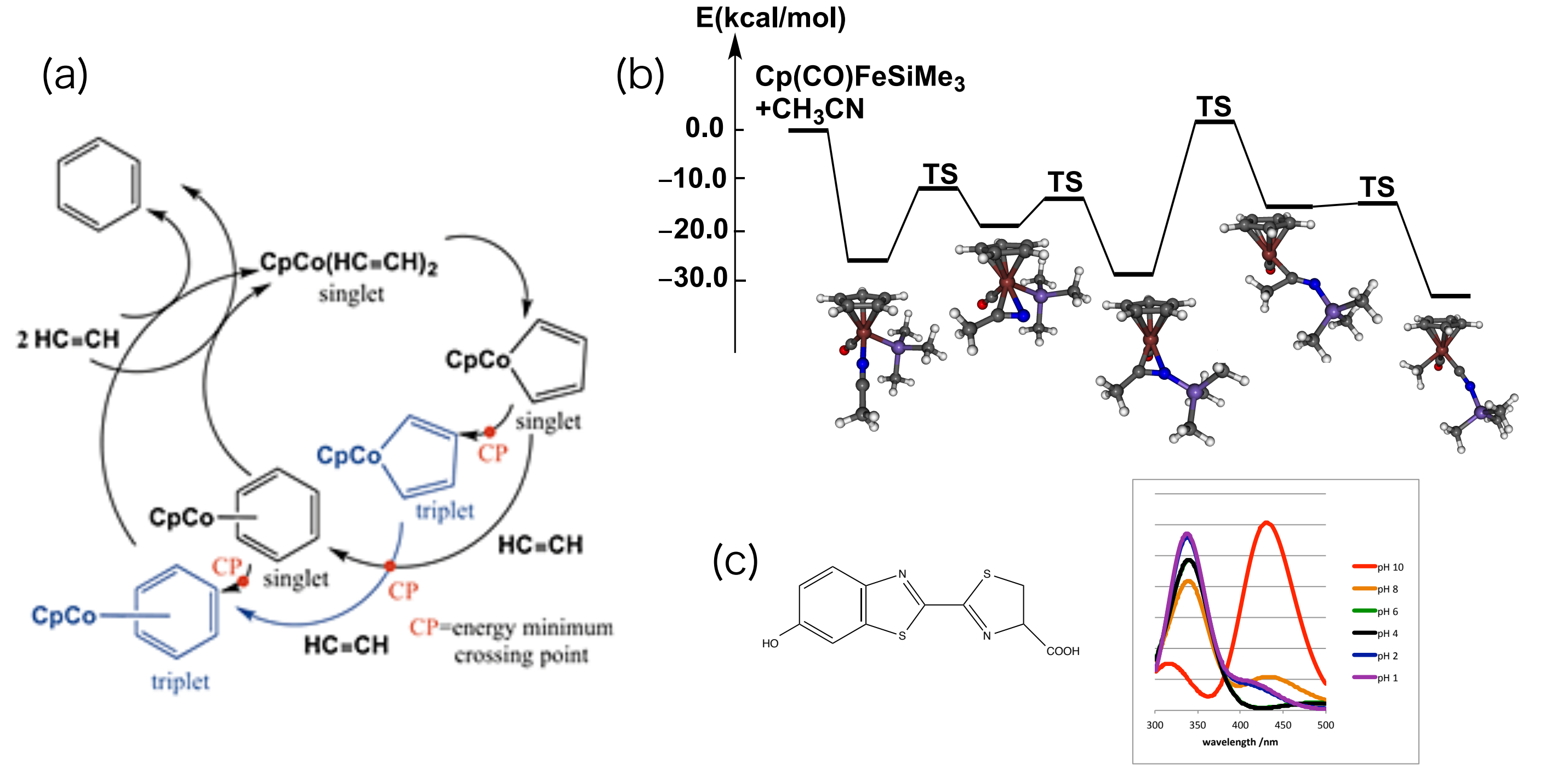
複雑な分子現象が物質情報へ、物質現象が組織化され機能発現へと統合転化する

自然における情報の伝達、変換、蓄積を担う重要な物質的基盤は、分子及びその集合体の運動、反応、構造である。物質情報論講座では、複雑な分子現象における情報の流れが機能発現へと統合・組織化される過程の解明を目指して、シミュレーション、多体系理論とアルゴリズム開発、非平衡ダイナミクス理論によって情報機能物質をデザイン・創製する原理を究明し、情報過程の物質的基盤に関する教育と研究を行っている。また、超並列計算、動力学専用計算機の活用と開発など、分子システムのシミュレーションに関する革新的な情報技術の教育と研究も合わせて進めている。

古賀研究室

計算から化学反応を知る

量子化学計算法を用いて、分子の構造や電子状態、化学反応の様子を明らかにし、理論的見地から、分子設計や化学反応設計を行う際に有益な情報を得ることを目指している。こういった計算では、反応物や生成物といった安定な分子のみならず、実験的には必ずしも知ることができない反応中間体や遷移状態のような不安定な分子や、未知の分子の構造や電子状態を明らかにすることができる。我々は、このような量子化学計算によって、有機遷移金属化学の素反応過程や錯体触媒サイクルなど触媒反応機構の解明と反応設計指針の解明を目指した理論研究を進めている。またそれ以外にも、最近ではホタルルシフェリン分子の吸収発光スペクトルに関する理論研究を進めている。

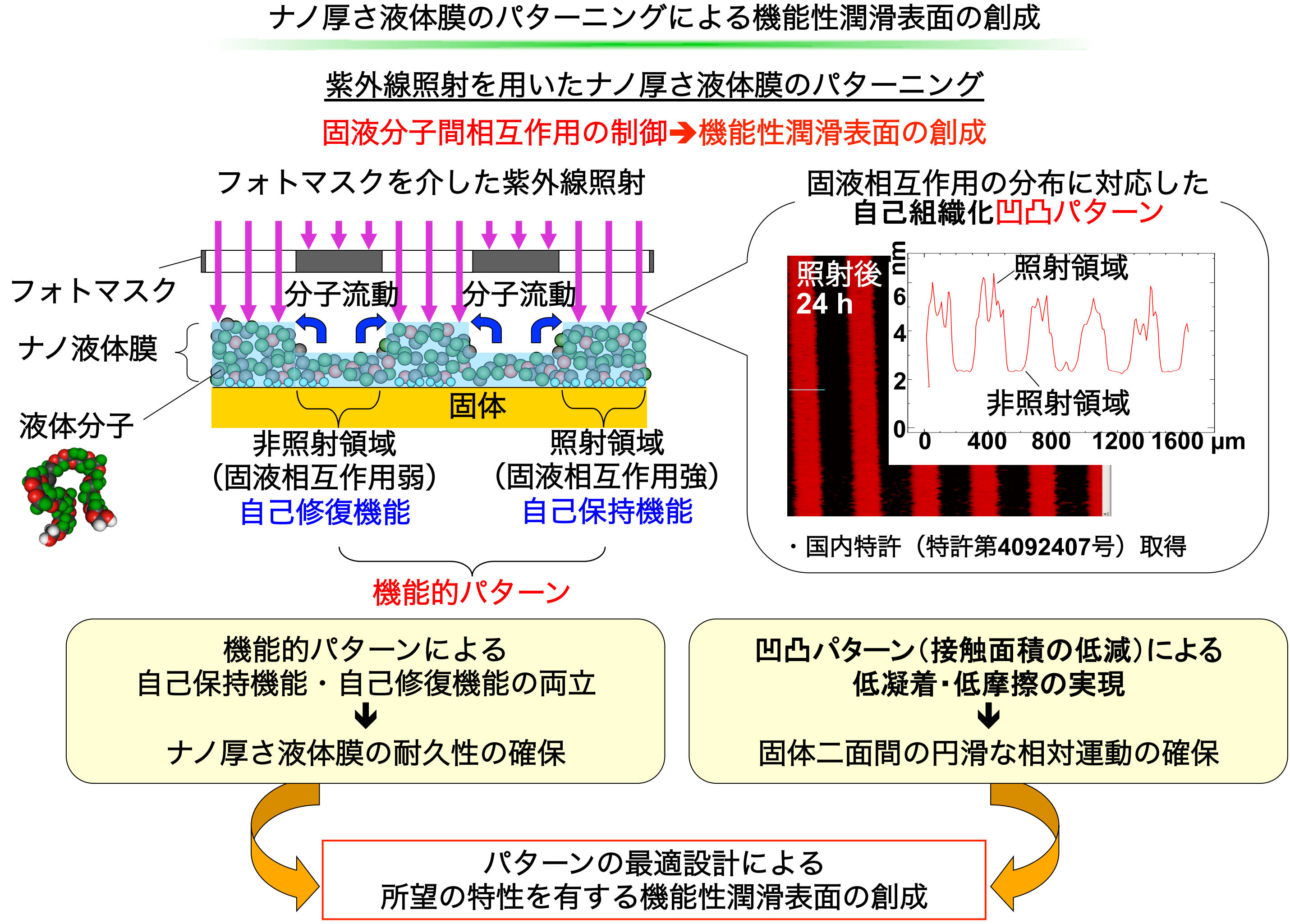


密度汎関数法計算によって明らかにした、(a)Co錯体によるアルキン三量化の反応経路、(b)シリルFe錯体によるアセトニトリルC–CN結合切断反応のエネルギー変化、および、(c)水溶液中のルシフェリン分子の理論紫外可視吸収スペクトルのpH依存性

張研究室

ナノワールドを観る、楽しむ

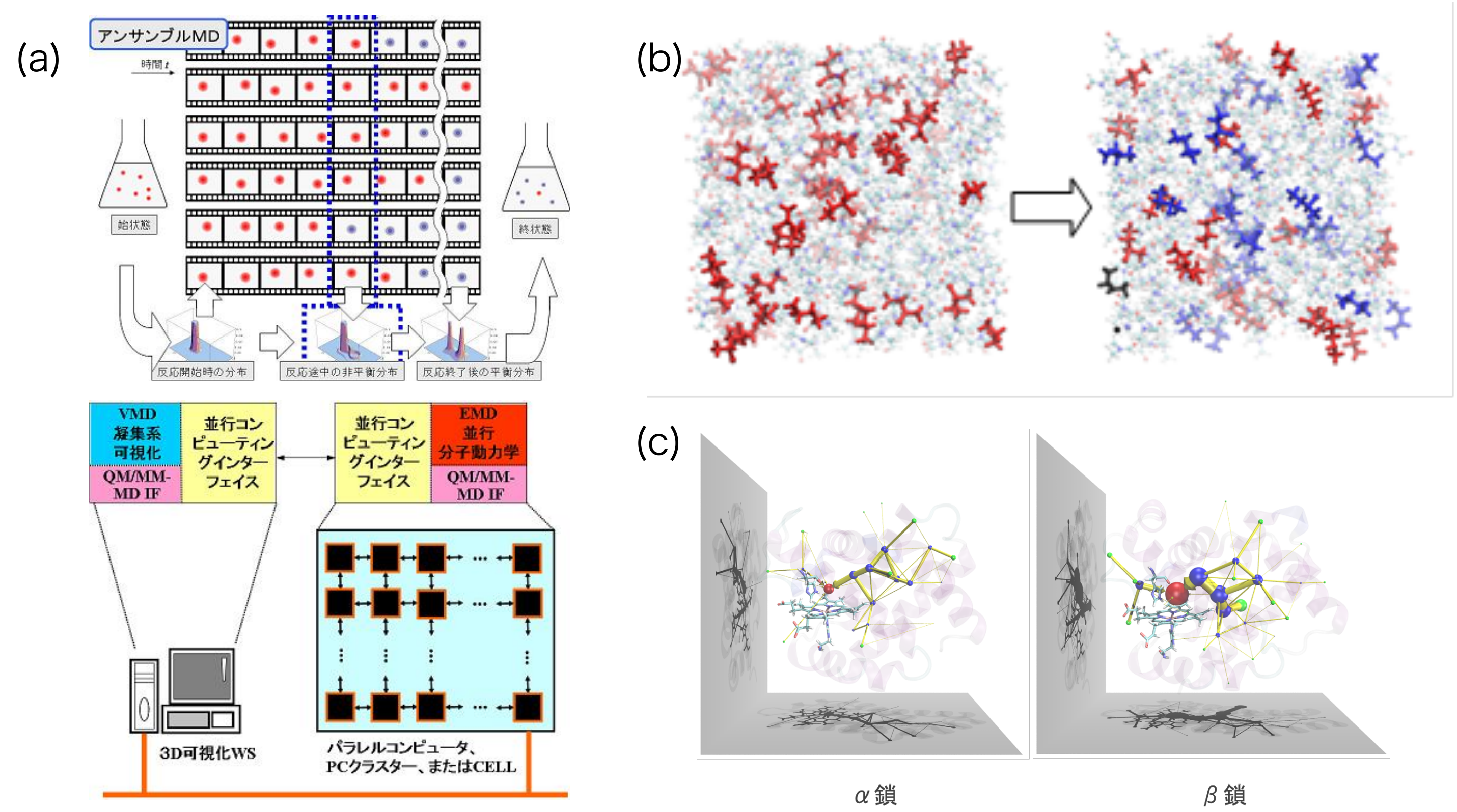
微細加工技術の進展に伴い、マイクロ・ナノスケールにおける機械工学の新領域が開拓されつつある。この領域では、スケール効果によって表面力が体積力をはるかに上回るため、表面の特性（濡れ性や、凝着・摩擦・摩耗といったトライボロジー特性など）がシステムの機能・性能を決定する主要因となる。したがって、システムの機械設計にあたっては、材料と構造の設計のみでなく、材料の固有特性を凌駕する新しい機能・性能を創成するための表面設計が強く求められている。本研究室では、機能性表面の創成を目的として、実験と分子シミュレーションの両面から研究を進めている。



長岡研究室

物質の変化を計算科学する！

人間を含めたこの世の中のすべての自然現象は、電子で決まる個性的な原子・分子が示す複合化学反応の物質ダイナミズムと捉えることができる。そのダイナミズムの根元は、自然が本来備えている非線形性、非平衡性、非定常性にある。長岡研究室ではコンピュータやネットワークを基礎にした情報科学的手法を生かして、物質現象における非平衡性と非定常性の現れ方を探り、その反応制御・立体制御・構造制御の本質に迫る。あなたも新しい物質科学と分子技術の誕生に立ち会ってみませんか！

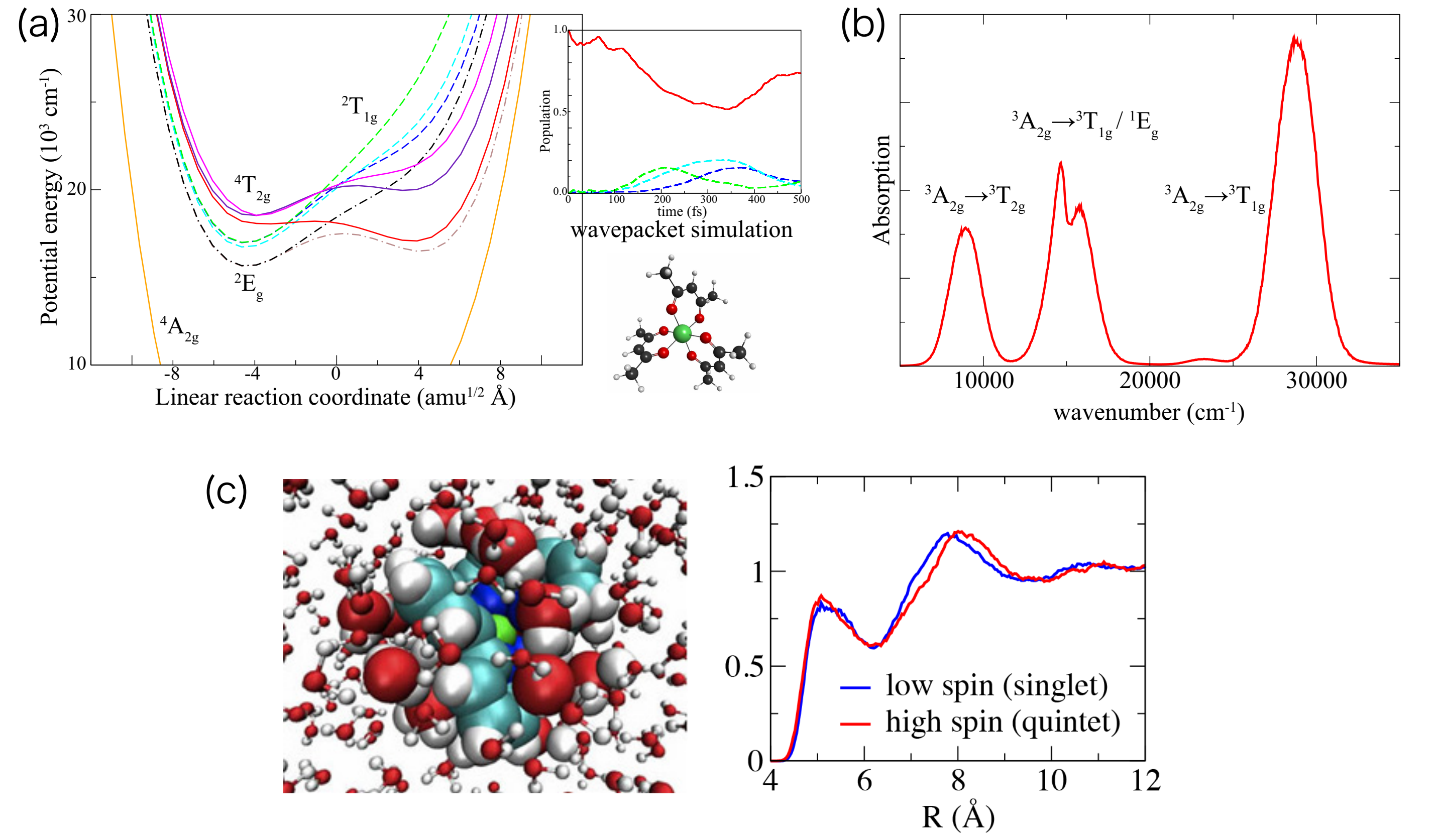


物質現象の計算化学 (a)アンサンブル分子動力学 (MD) 法の考え方と並列計算システム、(b)ジメチルホルムアミド中の2-クロロブタンのラセミ化反応（初期状態（左）と平衡状態（右）（R体は赤色、S体は青色、2-ブチルカチオン及び塩化物イオンは黒色））、(c)ヘモグロビンにおける酸素分子の侵入経路の解析（α鎖（左）とβ鎖（右））

井内研究室

計算機シミュレーションによる分子ダイナミクスの解明

量子化学計算や分子動力学計算といった計算機シミュレーションを用いて、溶液や界面での物質の構造や電子状態を明らかにし、光や環境によって物質の状態が変化する過程とその機構を統一的に理解することを目指している。最近は特に、多様な電子励起状態を有する遷移金属錯体を中心に、スピン状態変化などの物質の励起状態で起こるダイナミクスを動力学シミュレーションで理解することを目指して研究を進めている。そのために必要な方法論の開発と現実系への応用研究を行っている。



(a)高精度量子化学計算を用いて明らかにしたCr(acac)₃錯体の電子励起状態のポテンシャル面の様子。独自の励起状態計算法と動力学シミュレーションを用いて計算した、(b)Ni²⁺水溶液の電子吸収スペクトル、(c)[Fe(bpy)₃]²⁺水溶液の溶媒和構造の解析。