

# 光イオン化の理論研究

中島 慶治

量子化学

光化学

コンピュータ

研究室の所在：物質工学棟2階

## ・なぜこの研究をしているの？

化学反応の理解を目的として原子分子の量子力学計算を行います。実験では研究しにくい現象でも、シミュレーションで検証できる場合もあるからです。

## ・具体的に今やっているのはどんなこと？

化学分野用プログラム開発や化学反応の理解を目的とした原子分子の量子力学計算が主な研究内容です。計算機化学とも呼ばれ、物理化学の一分野です。分子モデリングソフトを使って、分子モデルをコンピュータ上で作成し、分子軌道計算用ソフトを用いて分子のエネルギーや安定構造を計算します。理論計算を行うと、実験では捕らえにくい短寿命種や不安定種の性質も把握しやすいため、化学反応の中身の理解に役立ちます。

## ・研究成果はどのようなモノやコトに役立つの？

実際に新規の化合物を合成してテストするのに比べて、計算は簡単に行えるので、合成試験の前のシミュレーション目的で材料開発や薬の開発現場でも多用され、新物質や材料の開発コストを抑えるのに役立っています。