

日時: 平成 30 年 2月23日(金) $14:00 \sim 15:30$

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はなく、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 CCMS 計算材料学センター

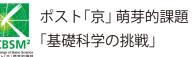
■協賛



計算物質科学

人材育成コンソーシアム

■ 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