



「GX材料の理論計算化学」

武次 徹也 理学院化学部門・量子化学研究室

email: take(at)sci.hokudai.ac.jp

研究室HP <https://wwwchem.sci.hokudai.ac.jp/~qc/>

関連キーワード「量子化学計算／光反応動力学／触媒理論設計」

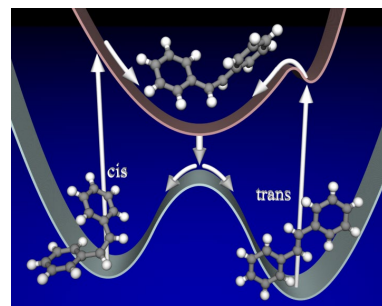
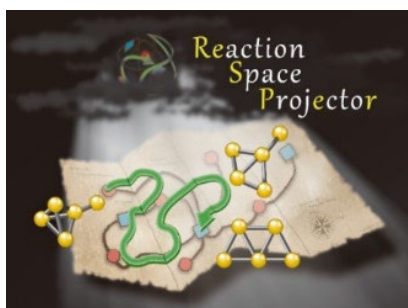
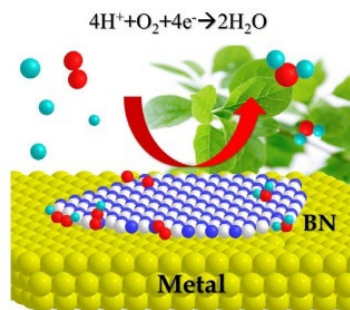
○キャッチコピー

理論計算化学がサポートするGX社会の課題解決

○研究の内容紹介

物質の振る舞いを支配する原理「量子力学」にもとづく理論計算化学により、未知物質の構造予測や化学反応素過程の機構解明が可能となっています。データ科学手法を実装して独自の反応解析手法を開発し、実験研究との連携によるGX材料開発の効率化や光反応素過程の機構解明に取り組んでいます。

- ・ 密度汎関数法による触媒材料の構造・結合・物性・反応の解明
- ・ 反応経路ネットワークと次元縮約にもとづく反応空間投影法の開発
- ・ フォトエキサイトニクスにもとづく光反応素過程の機構と動力学の解明



○社会実装への可能性

- ・ 元素戦略にもとづく燃料電池酸素還元触媒の開発
- ・ 光癌治療薬のインシリコ創薬
- ・ 水電解のための固体触媒開発

○産業界や自治体等へのアピールポイント

- ・ 密度汎関数法・波動関数理論を駆使した機構解明と新材料提案
- ・ 既知触媒材料の未知の機構を解明し新材料開発への知見を提供
- ・ 光吸収だけではなく発光や光反応の機構も探索可能

