

□ OPEN SEMINAR SERIES (3)

第4回

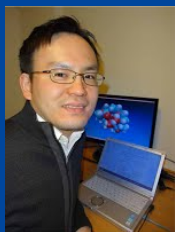
統合型材料開発・情報基盤研究交流会

人工力誘起反応 (AFIR) 法による 安定構造および遷移状態構造の自動 探索：結晶構造探索への展開

2017 **6.22** THRS.

Open 13:30-14:30

WPI-MANA Auditorium
NIMS Namiki site



北海道大学 大学院理学研究院化学部門
前田理 教授

我々は、反応経路を第一原理的に自動探索する手法として人工力誘起反応 (AFIR) 法を開発してきた。AFIR法は、反応経路自動探索プログラムGRRMに実装されており、これまでに様々な応用が展開されてきた。特に、有機反応や有機金属触媒など、均一系の化学反応において、その有用性が実証されている。さらに、QM/MM法を用いた酵素反応の解析、異なる電子状態のポテンシャルエネルギー面同士の交差点に着目した光反応の解析、統計論と組み合わせた金属クラスター触媒の解析など、様々な汎用化とその実践的な応用を進めてきた。最近、周期境界条件を導入した探索アルゴリズムを実装した。これにより、結晶構造探索、結晶の相転移経路探索、表面反応の解析などへの展開が可能となった。本発表では、AFIR法の概要とこれまでの応用実績についてレビューし、最近行った周期境界条件の実装とカーボンの結晶構造探索について詳しく述べる。

◎世話人：木野日織 ◎連絡先：運営室 (mii-i@ml.nims.go.jp)



"Materials research by Information Integration" Initiative

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ