

中井研究室 (電子状態理論研究)

計算化学の社会実装を目指して



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授

中井 浩巳

実験では見られないものを観る

量子力学を化学の問題へ適用

古典力学

$$\vec{m}\vec{a} = \vec{F}$$

Newtonの運動方程式
小さな物体では成立しない

量子力学

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Schrödinger方程式
電子の運動を記述可能

量子力学 + 化学 = 量子化学

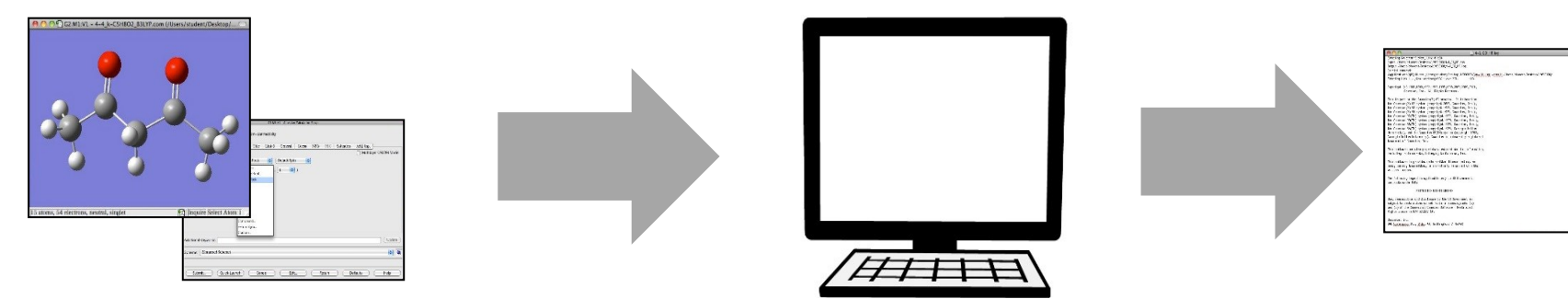
波動関数から
化学現象を解明、予測、設計

- Schrödinger方程式を解くことで得られる波動関数は分子の情報をつぶさに与える
- 実験で直接見ることのできない反応の遷移状態や電子移動過程についても解析可能

Ψ



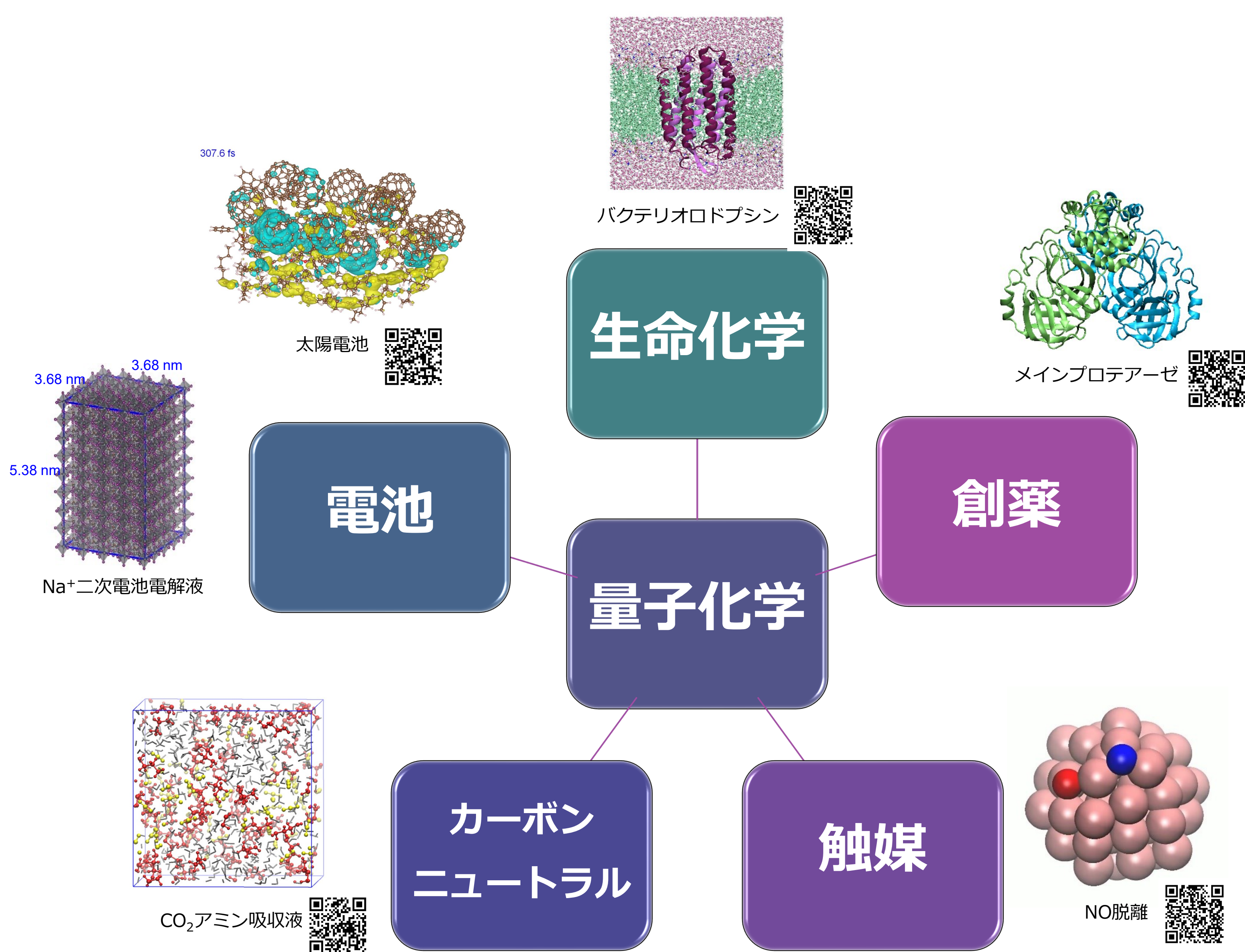
波動関数 (分子の電子状態)



コンピュータを使ったシミュレーション

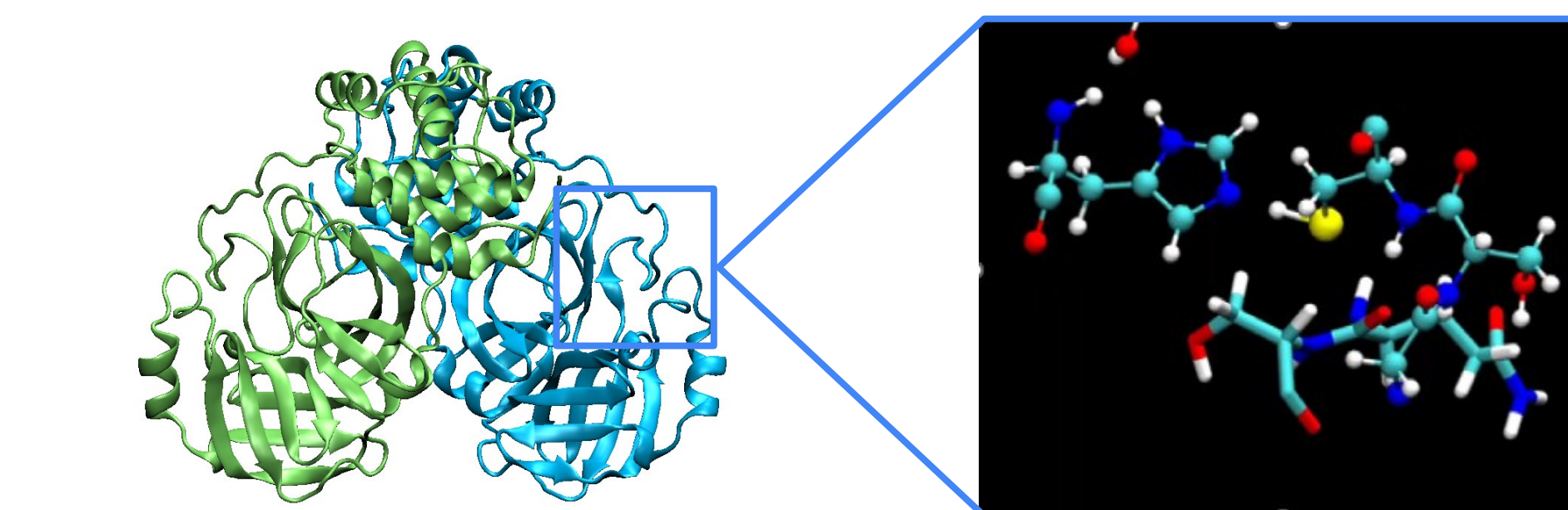
現実の系に対してSchrödinger方程式を解くことは困難であるため計算機を使用

量子化学計算を用いた研究



様々な分野に対して適用可能

➤ 創薬研究



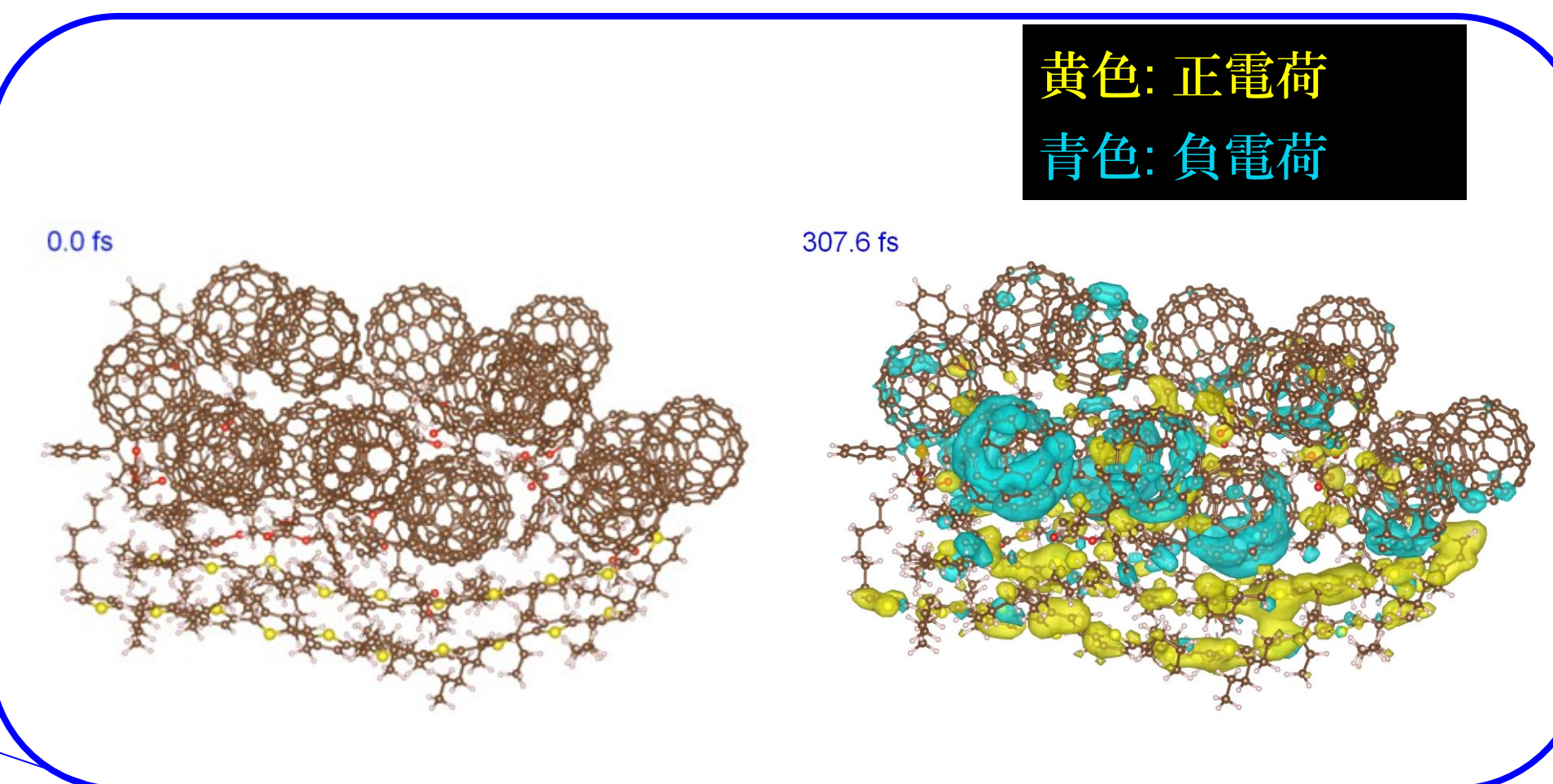
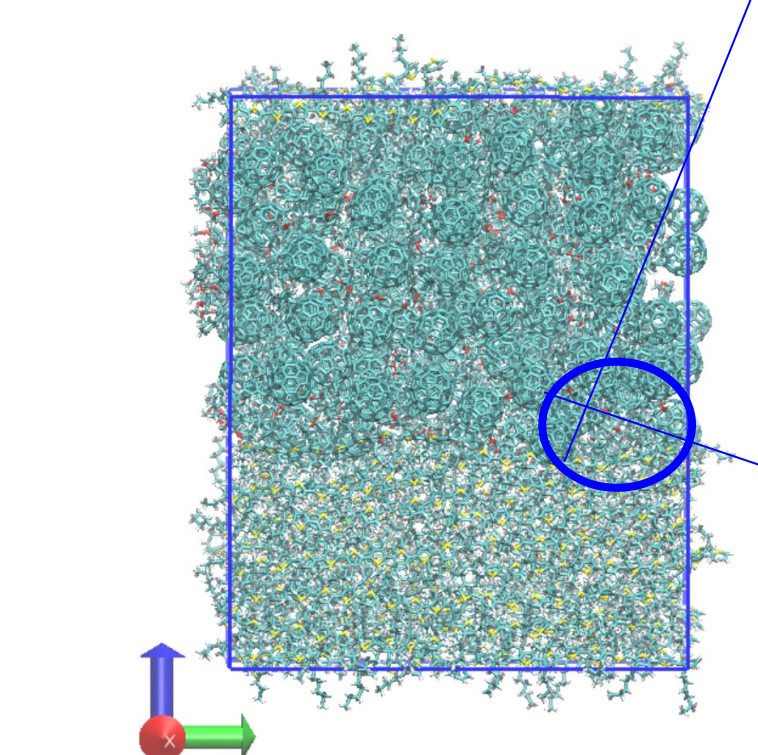
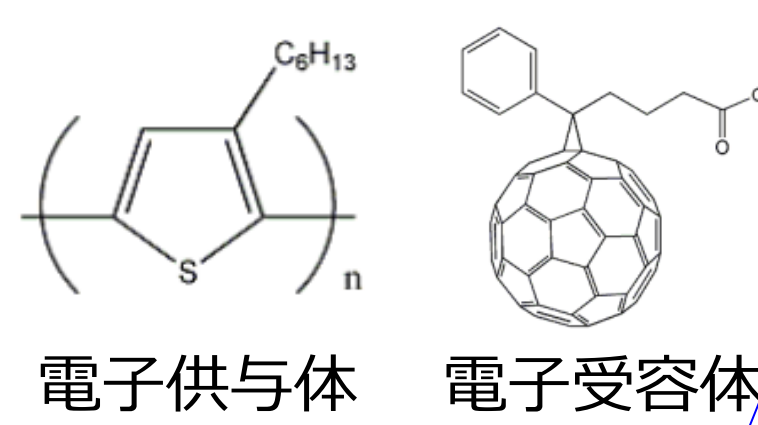
SARS-CoV-2 メインプロテアーゼ

酵素反応機構の解明

300万化合物に対するスクリーニング + 得られた化合物に対するドッキング

COVID-19の治療薬の開発

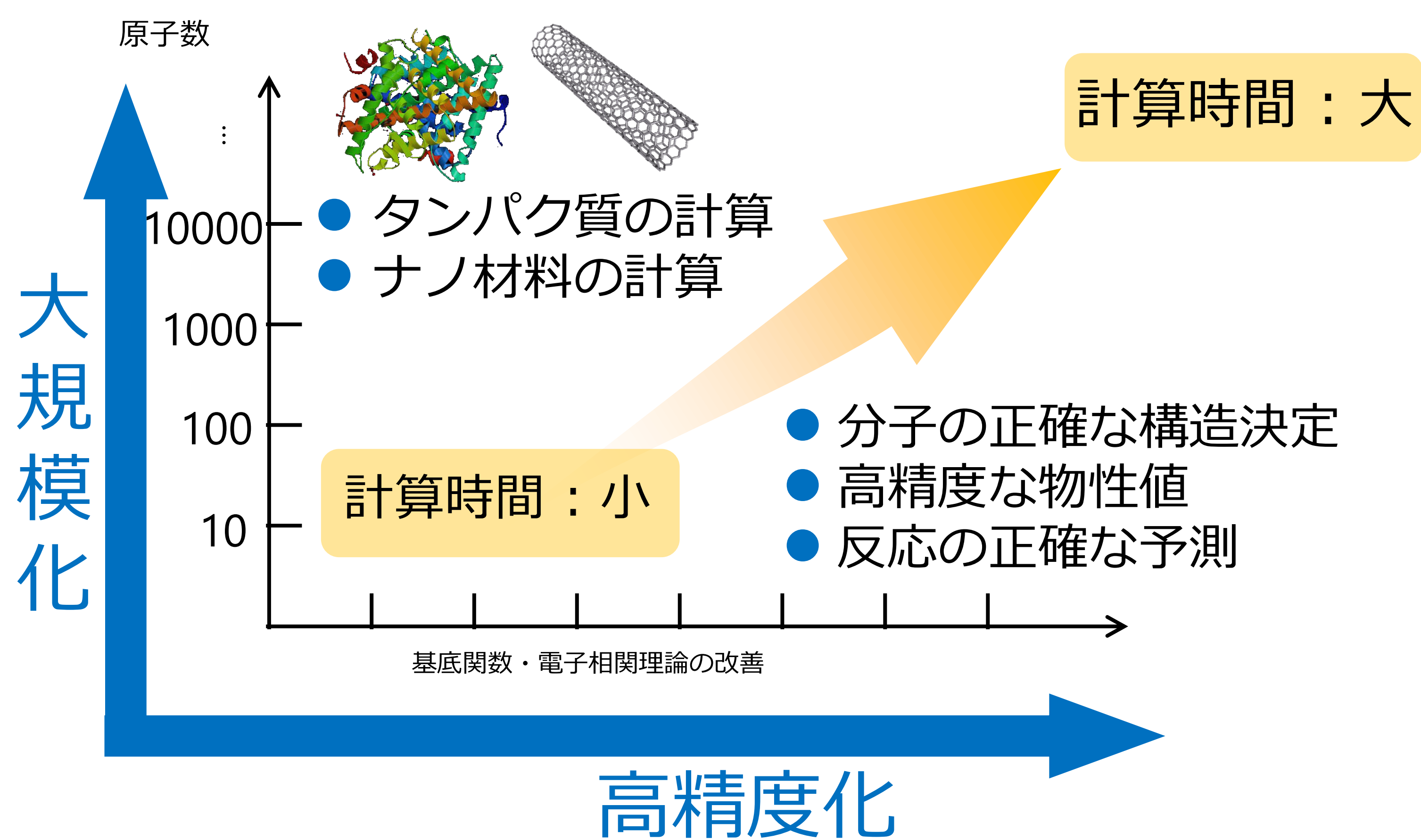
➤ 太陽電池



黄色: 正電荷
青色: 負電荷

太陽電池の動作原理を解明

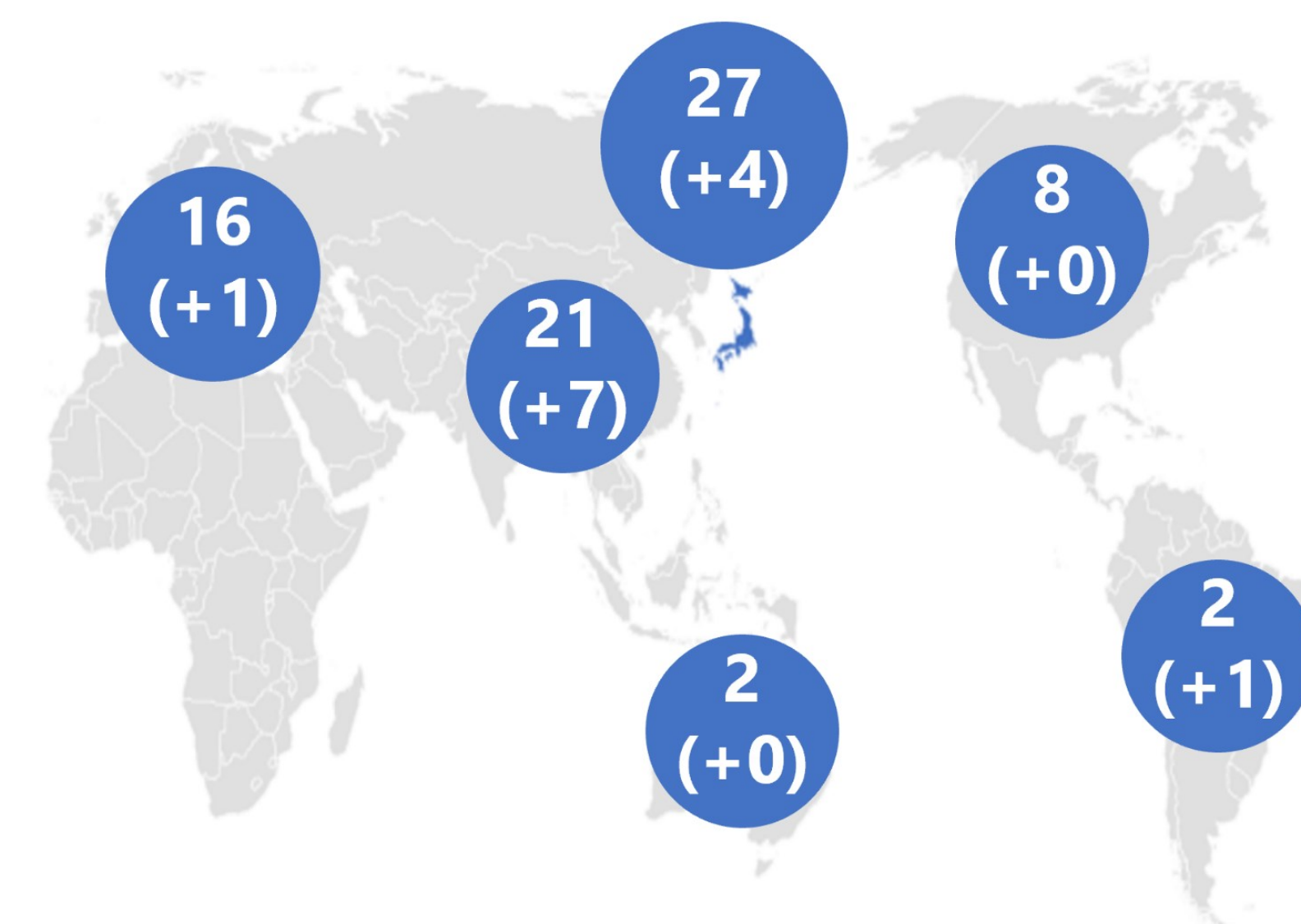
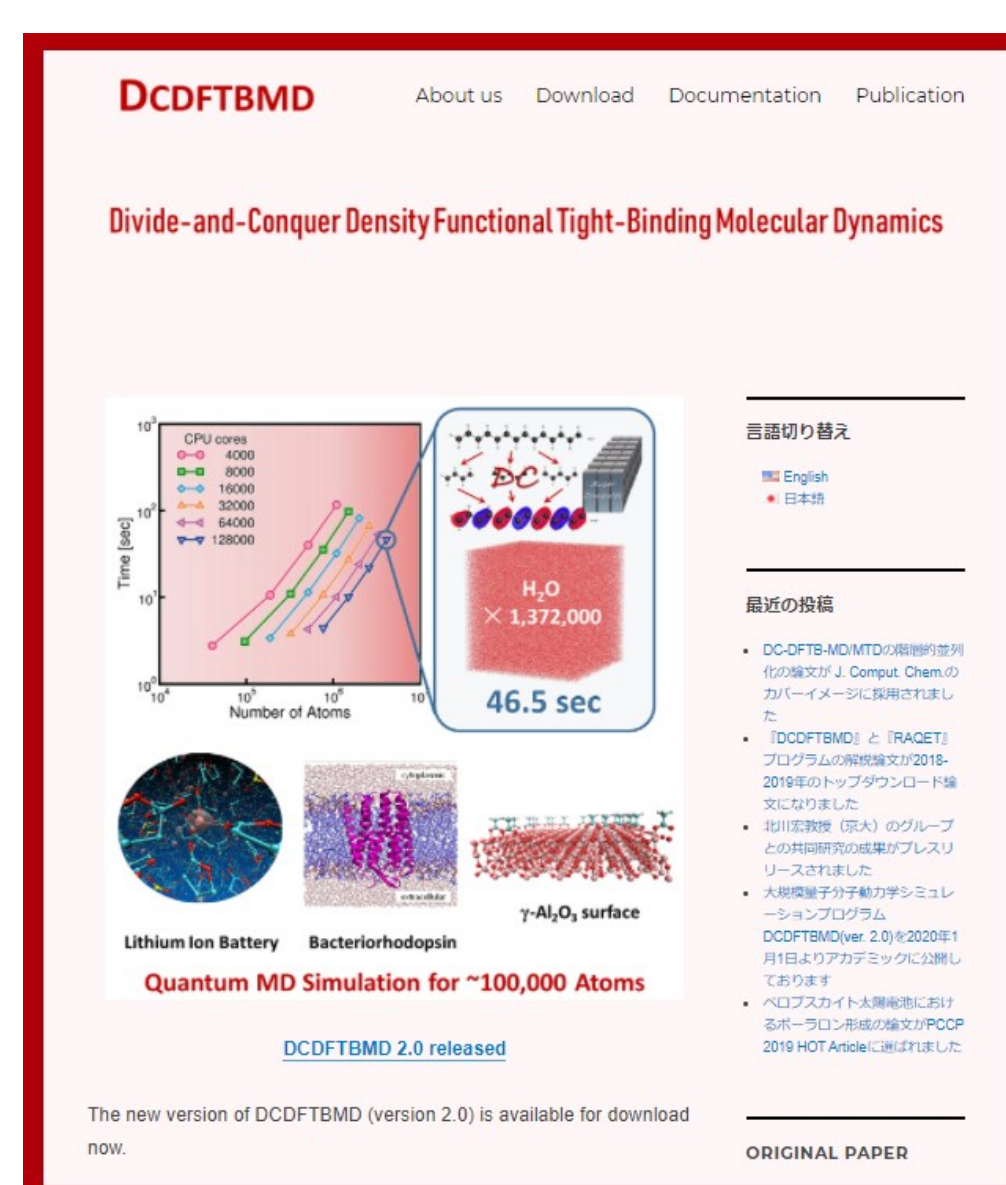
理論研究とプログラム開発



計算精度と計算時間を
両立する新たな理論の開発

➤ 量子化学計算プログラムの開発

DCDFTBMD の使用状況



大規模系に適したプログラムの独自開発 & 公開
23カ国で使用 (76の研究グループが使用)