

2S06

## ナノテク時代のコンピュータ化学

大澤 映二

ナノ炭素研究所 (〒386-8567 長野県上田市常田 3-15-1  
信州大学繊維楽部 AREC 内 OsawaEiji@aol.com)

ナノ粒子は、低分子と違って一般に精製不可能である。そのために、100%純粋な標品にして、化学で 200 年間かけて培ってきた知識・技術・方法論を活用して、原子レベルの精密な情報を得ることが一般に困難である。そのために、計算が実験よりも重要な役割を果たすことが往々にしてある。そこで、「ナノテク時代は、コンピュータ化学が実験に優先する」という仮説を掲げて、仮説に適合する事例を紹介する。

### 1. ナノダイヤモンド

(ア)SCC-DFTB 計算の威力：自発的ダイヤモンド-黒鉛転移に伴うコア・シェル構造、表面近くにアモルファスダイヤモンド層、粒子内電子分極と前例のない新しい粒子間相互作用様式 (A. Barnard, 2007-8)

(イ)爆発的燃焼 コンピュータ中で実現！実験を置き換えることができるか？ (X. Zhao, 未発表)

### 2. フラーレン

(ア)4員環は一般化 Stone-Wales 転移よりも有利な場合がある。

### 3. グラフェン (X. Zhao, 投稿中)

(ア)2次元超芳香族性 (藤田光孝、1996)