

# 電子密度変化の統計的解析に基づく水素結合系の静電分極モデルの生成法開発と応用



鳥居 肇

静岡大学・教授

水と材料の分子レベル・ナノ集合レベルでの相互作用を捉えるためには、水分子が置かれている状態による特性の差異を生み出すメカニズムを考慮することが重要です。本研究では、それを的確に表現できる理論モデルを構築することを目指します。そのために、分子間相互作用によって起こる静電分極に深く関わる電子密度変化

を、多様な分子配置を考慮して統計的に解析することや、分極に関係するスペクトルをシミュレーションすることによる理論モデルの妥当性の検証などを行い、実在系への応用展開を図ります。

