

研究室公開展示

C-10 分子機能発現における分子間相互作用の役割を解明する凝縮相系理論化学研究

- 凝縮相における機能性分子の分子間相互作用と分光スペクトルの相関
 - ・水素結合は、水との相互作用により発現する分子機能のほか、水の液体として特有な性質などにおいて、重要な役割を果たしています。
 - ・こうした相互作用を、光を用いて検出するために、分子間相互作用と分光スペクトルの相関の解析を進めています。
- 電子密度解析に基づいた分子間相互作用の可視化
 - ・分子間相互作用において、電子の振舞いはさまざまに関わっています。
 - ・この性質を利用して、分子間相互作用を2次元・3次元的に可視化するための解析を進めています。

