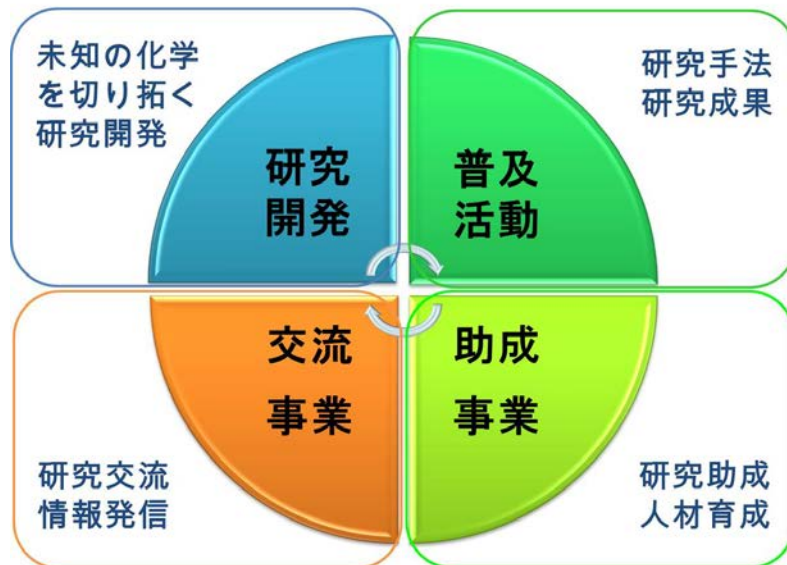


特定非営利活動法人

# 量子化学探索研究所

Institute for Quantum Chemical Exploration

- 趣 旨： 量子化学で未知の化学を切り拓く(探索する)
- 設 立： 2013年2月15日
- 設立地： 東京都港区 海岸3-9-15
- 事 業：



## 助成事業

IQCEは 量子化学探索の研究者を援助します

- 研究助成 (毎年5件以内・総額250万円)
- 奨学助成 IQCE特別研究員 (毎年数名以内・月額10万円最長3年)

## 普及事業

IQCEは 量子化学探索技術普及活動を進めます

- GRRM講習会「GRRMチュートリアル」
- GRRM技術指導

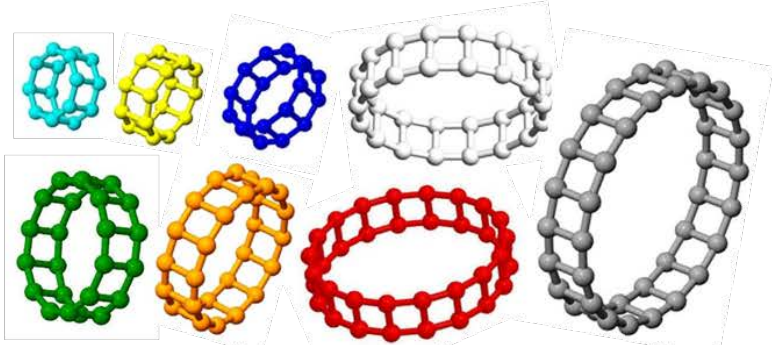
## 交流事業

IQCEは シンポジウム・講演会を開催します

- シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア」
- 講演会「量子化学で探る化学の最先端」

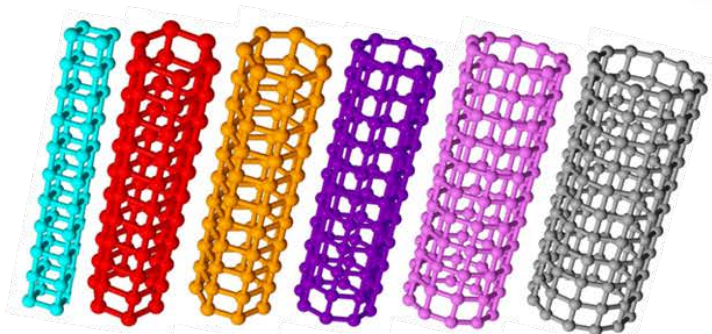
# 新物質の探索 : 新しい炭素

Prism- $C_{2n}$  ( $n=8, 9, 10, 12, 14, 16, 18, 20$ )

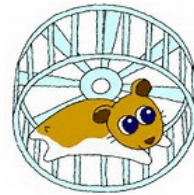


Chem. Lett. 44, 712 (2015).

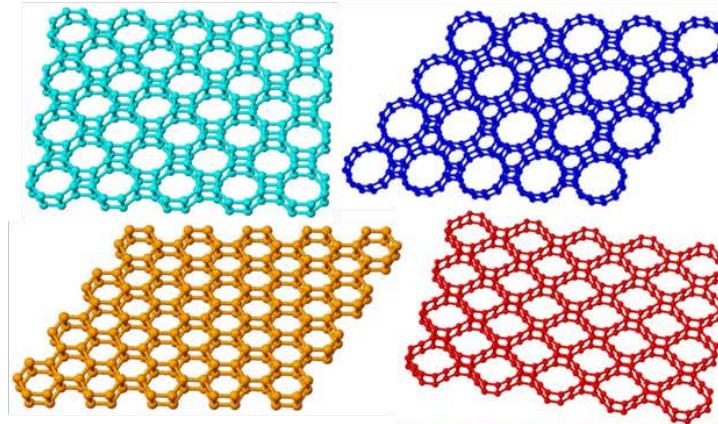
Prism-Carbon Tube



Chem. Phys. Lett. 635, 180 (2015).

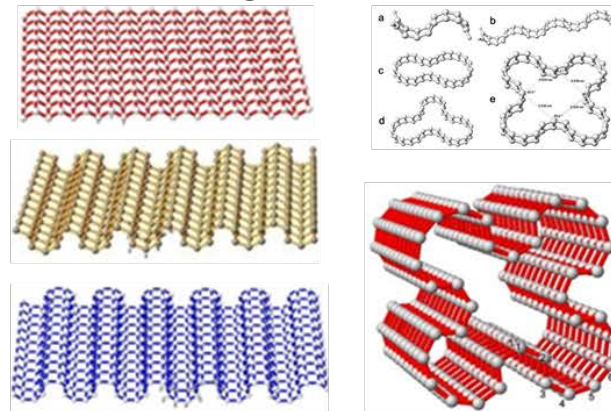


Prism-Carbon Sheet



Chem. Phys. Lett. 633, 120 (2015).

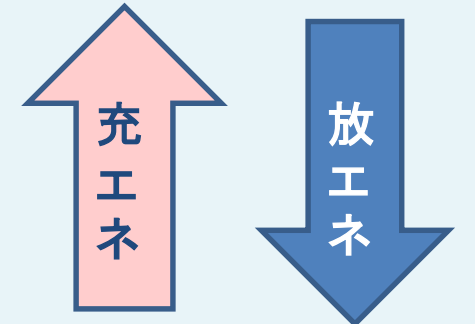
Wavy Carbons



Chem. Phys. Lett. 639, 178 (2015).

## エネルギー貯蔵物質

高エネルギー炭素

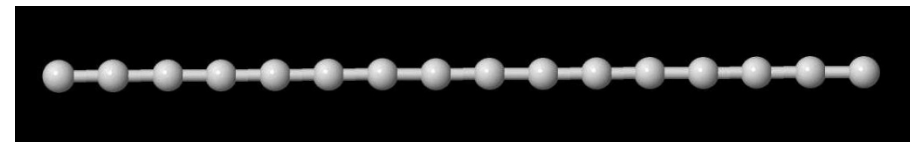
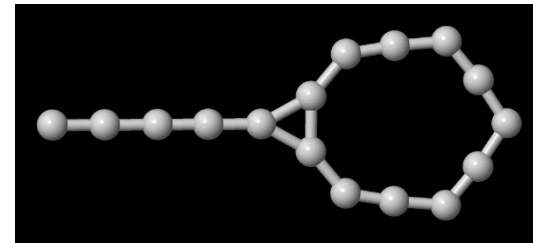
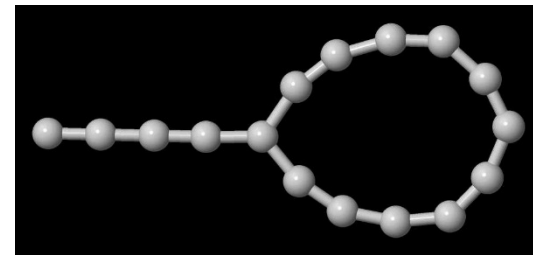
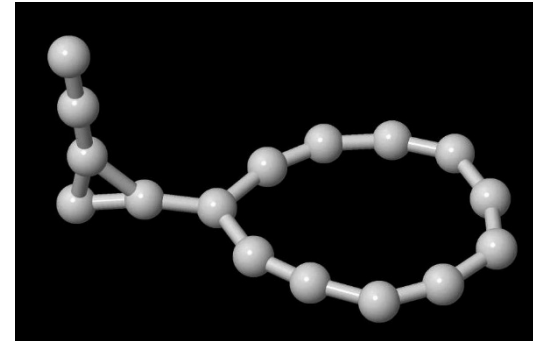
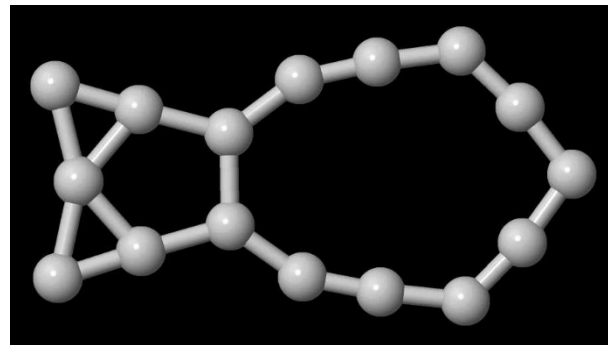
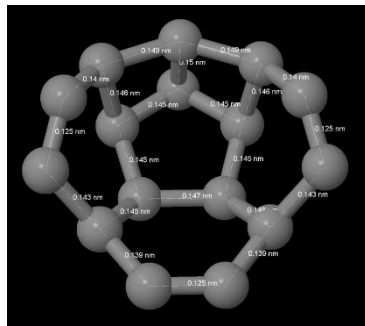
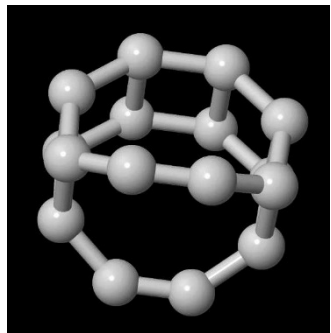
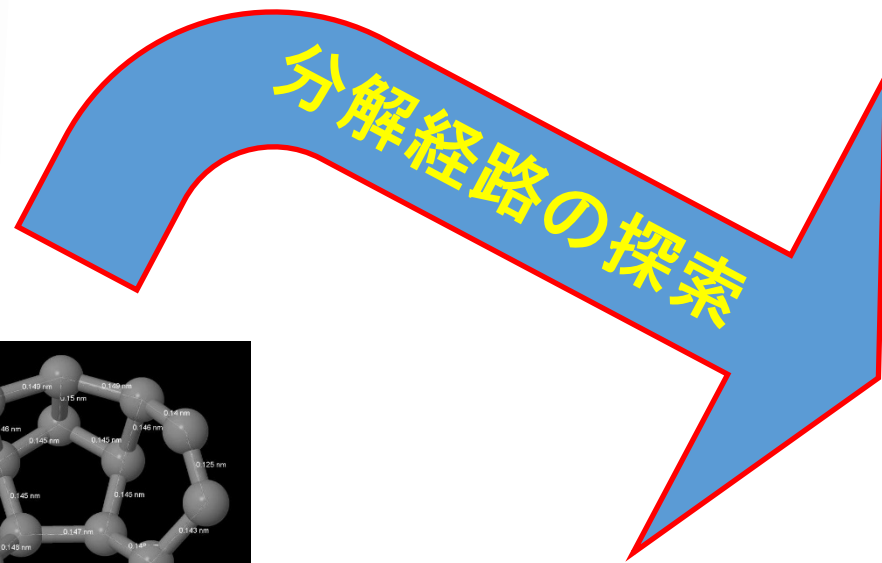


低エネルギー炭素

ゼロ廃棄物質  
ゼロ原料補給

時・所・回数 無制限

# Prism-C16 合成法? の探索





# GRRMの魅力

予備知識なしに  
量子力学に基づき  
「**未知の化学**」  
を切り拓き、  
世界をリードする！

# 新技術の開拓

## NeoGRRM

- Nodeの壁を越えた探索
- H3CNO3 B3LYP/6-31G\*

16コア機1台で	361日	
256コア機1台で	12.4日	
	EQ676	TS4835
- H6C6 RHF/6-31G

4コア機で	6年かかって未終了	
256コア機1台で	11.9日	
	EQ2727	TS23565