

「CUFF(Consistent Charge Equilibration with Universal Force Filed)の開発と色素増感型太陽電池への応用」

講演者氏名	北尾修
所属	産業技術総合研究所光反応制御研究センター
講演タイトル	「CUFF(Consistent Charge Equilibration with Universal Force Filed)の開発と色素増感型太陽電池への応用」
講演概略	我々は生体系や材料系における光誘起電子移動を研究するために、数万原子から構成される系の構造・光誘起電子励起や電子移動現象に依存した静電場を信頼性よく構成できる力場、CUFF(Consistent Charge Equilibration with Universal Force Filed)、を開発した。この力場では電荷計算と勾配計算に同じ静電エネルギー項を採用しており静電項の取扱いに関する矛盾を解消している。講演ではCUFFの紹介と人工光合成材料である色素増感型太陽電池への応用について述べる。