

第1回 岩手量子化学計算講演会

主催：岩手量子化学計算研究会

共催：岩手大学物質機能・エネルギー科学系

協賛：日本化学会東北支部

日時：2016年10月31日(月) 15:00～17:30

場所：復興祈念 銀河ホール（岩手大学 理工学部内）

プログラム

15:00～15:50 岩手大学における量子化学計算

是永 敏伸 先生（岩手大学 理工学部 化学コース 准教授）
「錯体触媒および有機分子触媒反応の遷移状態解析」

鈴木 映一 先生（岩手大学 理工学部 化学コース 助教）
「分子錯体の量子化学計算」

16:00～17:30 招待講演

都築 誠二 先生（産業技術総合研究所 上級主任研究員）
「*ab initio* 分子軌道法を用いた分子間相互作用の解析」

招待講演者のご紹介

都築先生は量子計算化学を用いた分子間相互作用の理論評価の第一人者です。本招待講演では、都築先生が昨年上梓なされた、

「有機分子の分子間力」（東京大学出版会）

の内容に沿って、下記に示すお話をさせて頂く予定です。

- ・分子間力の種類
- ・分子間相互作用エネルギーの計算
- ・種々の相互作用の解析例（CH/ π 、 π / π 、カチオン/ π 相互作用、ハロゲン、カルコゲンの相互作用）

分子間力は、結晶のパッキング、分子認識、さらには生命現象に関わる分子生物学に密接に関わっています。幅広い分野の専門家や、化学の基礎を学ぶ学生さんに最適な内容です。