

# 第2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 SPERC 二酸化炭素高度利用研究グループ

協賛：日本化学会東北支部

日時：2017年11月8日(水) 14:45～17:30

場所：復興祈念 銀河ホール（岩手大学 理工学部内）

参加費：無料

## プログラム

14:45～14:50 挨拶（研究会代表 是永敏伸）

14:50～15:50 研究会員による活動報告

木村 毅 先生（岩手大学 研究推進機構 准教授）  
「ベンゾビストリセレノールの合成とそのジカチオン」

村岡 宏樹 先生（岩手大学 理工学部 化学コース 助教）  
「理論計算を用いた分子物性の解明と予測」

16:00～17:30 招待講演

山中 正浩 先生（立教大学 理学部 化学科 教授）  
「不斉分子触媒反応の立体制御機構に関する理論的研究：  
触媒骨格の柔軟性と剛直性」

### 招待講演者のご紹介



山中先生は、高精度量子化学計算と実験の連携による分子性触媒の開発、およびその反応解析に取り組んでおられる研究者の一人です。本招待講演では、山中先生が精力的に取り組まれておられる不斉分子触媒の遷移状態を含む反応機構解析に関して、お話して頂く予定です。山中先生のご研究は、「なぜそうなるのか」という踏み込んだ解析をなされているため、触媒反応の研究者のみならず広く有機化学や反応化学に携わる方に参考になる内容です。