

第3回 SPERC 計算化学講演会 兼 第4回 岩手量子化学計算講演会

主 催：岩手大学理工学部附属ソフトパス理工学研究センター（SPERC）
計算化学主導型分子設計研究グループ
「計算化学主導による分子創製基盤の構築」プロジェクト
岩手量子化学計算研究会

協 賛：日本化学会東北支部

日 時：2019年12月20日(金) 15:00～17:30

会 場：テクノホール（岩手大学 理工学部）

参加費：無料（どなたでも参加できます）

ソフトパス理工学研究センター（SPERC：吉本則之センター長）内の計算化学グループ長の是永をリーダーとして「計算化学主導による分子創製基盤の構築」プロジェクトが始動しております。
今回、プロジェクトの中核となる計算化学の最前線に焦点を当て、東邦大学の坂田健先生をお招きし、講演会を開催します。

プログラム

15:00～15:15 趣旨説明

是永 敏伸 プロジェクトリーダー（化学コース 教授）
「計算化学主導による分子創製基盤の構築プロジェクトについて」

15:15～15:50 研究会員による活動報告

鈴木 映一 先生（岩手大学 理工学部 化学コース 助教）
「エネルギー分割解析による分子間相互作用の理解」

16:00～17:30 招待講演

坂田 健 先生（東邦大学 薬学部 教授）
「計算化学的手法による遷移金属触媒反応の反応機構解明を目指して：
ルテニウム錯体を用いたアンモニアの触媒的酸化反応を中心に」



招待講演者のご紹介

坂田先生は、有機金属触媒や有機分子触媒の遷移状態解析で多くの研究業績を挙げられている研究者で、有機化学系計算化学分野を牽引する若手研究者の一人です。
今回、Nature Chemistryに掲載されたアンモニア分子の酸化反応の触媒機構解析を中心に、計算化学を用いた反応解析の神髄をご講演頂く予定です。