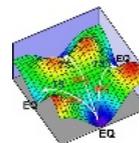




シンポジウム「化学反応経路 探索のニューフロンティア」



● シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2017」

本シンポジウムは、化学反応経路探索の新手法の開発と応用研究、ならびに化学反応の理論研究の最先端について討論する場として、2009年より始められました。分子科学討論会の開催時期にあわせて、これまで、名古屋、京都、札幌、東京、京都、広島、東京、京都で開催し、9回目となる2017年度は仙台で開催いたします。

本年度は、以下の要領で開催を予定しております。

- 日時： 2017年9月14日(木)10:00-17:30
- 場所： 東北大学大学院理学研究科 合同C棟2F アオバサイエンスホール
アクセス: 仙台市営地下鉄 東西線青葉山駅 北1出口歩2分
- 主催： [量子化学探索研究所](#)
- 協賛： 日本化学会、分子科学会、触媒学会
- 参加費： シンポジウムは無料、懇親会は有料
- 懇親会： 東北大学川内北キャンパス Bee Arena Cafe (講演終了後、18時～20時の予定)
- 実行委員(世話人): (東北大院理)河野裕彦、岩本武明、松田欣之、岸本直樹

たくさんの方々のご参加をお待ちしております。

(招待講演者・講演題目)

- ・ 古屋謙治 (九州大学)
反応物のダイナミックな運動によって隠される反応経路
Reaction paths hidden by dynamic motions of reactants
- ・ 内山真伸 (理研・東大院薬)
理論と実験の協奏による物質創製・機能開発
Synthetic Chemistry and Creation of Innovative Functions by the Integration
of Theoretical Calculation
and Experimental Chemistry
- ・ 高橋まさえ (東北大学院農) テラヘルツ分光と理論化学
温度依存テラヘルツスペクトルで検出される分子間水素結合ネットワークと
非調和性
Hydrogen-bonded network and anharmonicity detected by temperature-
dependent terahertz spectra
- ・ 佐藤寛子 (情報・システム研究機構, チューリッヒ大学)
QM データ中心ケミストリ : PES に基づく立体配座の遷移ネットワークの自
動推定
QM-based Data-centric Chemistry : PES-based Automatic Deduction of
Conformational Transition Networks
- ・ 大野公一 (量子化学探索研究所)
ポテンシャルの下方歪みと反応経路自動探索
Downward Distortion on Potentials and Automated Reaction Path Search

- [[シンポジウム: 発表・参加申し込み](#)]
(上のリンクをクリックする申込ページが開きます)

口頭発表申込×切 : 2017 年 7 月 31 日 (月)

ポスター発表・参加申込×切 : 2017 年 8 月 15 日 (火)

講演会・懇親会事前申込締切 : 2017 年 8 月 31 日 (木)

シンポジウム連絡先(世話人代表:河野裕彦)
東北大学大学院理学研究科化学専攻
E-mail: srps2017@excite.co.jp

IQCE 連絡先: sr*ps@iq*ce.jp (*を外してご利用下さい)