

速報発信者：大野公一（豊田理化学研究所）

シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア」開催のお知らせ

化学反応経路を探索し未知の化学を切り拓くことは、人類がかかえるさまざまな問題の解決に向けて大変重要な課題です。このたび、これまで非常に困難であった化学反応経路探索の新手法の開発と応用研究の最先端について討論するシンポジウムを開催することとなりました。みなさまのご参加をお待ち申し上げます。

主催：豊田理化学研究所

日時：2009年9月24日(木)18:00—9月25日(金)15:30

場所： 豊田中央研究所・豊田理化学研究所 アクタス会議室：名古屋市営地下鉄東山線藤が丘駅からリニモ(モノレール)乗車(約8分)、長久手古戦場駅下車歩7分

案内図：<http://www.tytlabs.co.jp/japanese/comp/accessmap.pdf>

参加申込（参加費無料、事前申込者以外は参加できません）

締め切り：8月31日（月）

- 1) 氏名、所属、身分、メールアドレス
- 2) 初日の懇親会（会費3000円）への参加・不参加
- 3) 2日目の昼食（弁当+飲み物：1000円）の要・不要
- 4) 駐車場の要・不要

1)~4)を記入して以下まで電子メールでお申し込み下さい。

連絡先

大野公一

豊田理化学研究所

Riken-ohno@mosk.tytlabs.co.jp

tel: 080-1620-8153

シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア」

プログラム

9月24日（木）

18:00-18:05 Opening

座長 中辻 博（量子化学研究協会）

18:05-18:30 諸熊 奎治（京大福井研究センター）

「化学反応経路探索の過去・現在・未来」

18:30-18:55 大野 公一（豊田理研）

「超球面探索法の開発と応用」

19:00-20:30 懇親会

9月25日（金）

座長 武次 徹也（北大）

9:00-9:50 前田 理（豊田理研）

「化学反応経路探索GRRMプログラムの概要と利用法」

9:50-10:10 山門 英雄（和歌山大）

「超球面探索法を用いた結晶構造予測」

10:10-10:30 古屋 謙治（九大）

「 $\text{CF}_3^+ + \text{CO}$ 衝突反応実験とGRRM計算」

休憩

座長 江原 正博（分子研）

10:40-11:00 徳江 郁雄（新潟大）

「精密ポテンシャル曲面に基づいた硫黄化合物の光解離過程」

11:00-11:20 中 寛史（名大）

「分子触媒開発のための化学反応経路探索」

11:20-11:40 岩本 武明（東北大）

「有機ケイ素化学における反応経路探索」

11:40-12:00 佐々木 岳彦（東大）

「密度汎関数法によるフェノール合成に活性なHZSM-5 中に固定化した

Reクラスターの活性構造と反応機構の研究」

昼食

座長 岩田 末廣（豊田理研）

13:00-13:20 佐藤 寛子（国立情報研）

「化学反応経路データベースの構築」

13:20-13:40 高柳 敏幸（埼玉大）

「水和クラスターの分子動力学計算」

13:40-14:00 松田 欣之（東北大）

「ホルムアミド-水クラスターの光イオン化ダイナミクス」

座長 山口 兆（豊田理研）

14:00-14:20 林 重彦（京大）

「タンパク質中の化学反応経路と動力学」

14:20-14:40 兵頭 志明（豊田中研）

「衝突頻度の計算法と効率的反応経路探索法への期待」

14:40-15:00 武次 徹也（北大）

「 Ab initio 分子動力学法とポテンシャル曲面生成」

Closing