

## IQCE 量子化学探索講演会 2015 のお知らせ

IQCE は、人類がかかえるさまざまな問題の解決に向けて量子化学に基づく探索研究を普及・発展させることを目的に 2013 年に発足し、シンポジウム開催や研究助成をはじめとして様々な事業に取り組んでおります。昨年度は GRRM 誕生十周年を迎え、さらに最新の GRRM プログラム (GRRM14) を発表したことを記念し、諸熊奎治先生を特別講師にお迎えして講演会「GRRM で拓く化学のニューフロンティア」を開催しました。

本年度も量子化学探索に関わる先端研究を展開しておられる先生方を講師にお迎えし「IQCE 量子化学探索講演会 2015」を下記内容で開催いたします。多数の皆様のご参加をお待ち申し上げます。

日時：2015 年 11 月 29 日（日）10:00～17:00

場所：東京大学本郷キャンパス 山上会館会議室

主催：特定非営利活動法人量子化学探索研究所

プログラム：

講演会（無料）10:00～15:20

講演者：（所属）「予定講演題目」

開会 大野公一（量子化学探索研究所 理事長）

「人工力誘起反応法の拡張：光化学反応および表面化学反応へ」 前田理（北海道大学）

「分光実験と量子化学計算による星間分子の電子遷移波長の推定」 荒木光典（東京理科大学）

「不飽和ケイ素を持つ有機ケイ素クラスター分子の構造と反応性」 岩本武明（東北大学）

「GRRM/AFIR 法による未知中間体を含む複雑有機反応の解析」 植松遼平（京都大学）

「ホタル生物発光の量子化学計算と反応機構」 樋山みやび（東京大学）

「GRRM プログラムを用いた分子の fragmentation と isomerization の効率的自動探索」

岸本直樹（東北大学）

「GRRM/SCC-DFTB プログラムを用いた異性化経路探索と結晶構造予測」 時子山宏明（和歌山大学）

「エネルギー貯蔵物質・高エネルギー炭素構造の探索」大野公一（量子化学探索研究所、東北大学）

閉会后 懇親会（有料）15:30～17:00

### 事前申込

氏名、所属、講演会参加の有無、懇親会参加の有無 を記載の上、電子メールで下記宛てにお申込みください。

mail@iqce.jp（講演会資料等は事前申込頂いた方に優先的にお配りします）

（講演会のみ参加申込は 11 月 27 日（金）まで受け付けます）

### 懇親会

懇親会費： 事前（一般 4000 円、学生 2000 円）、当日（一般 6000 円、学生 4000 円）

懇親会事前申込締切：11 月 20 日（金）

懇親会参加費振込先：<http://iqce.jp/index.shtml> をご参照ください。

実行委員（世話人）：武次徹也（北海道大学）、佐々木岳彦（東京大学）