

## IQCE 量子化学探索講演会 2019 「量子化学で探る化学の最先端」

量子化学探索研究所（IQCE）は、人類がかかえる様々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。その活動の一環として、量子化学探索に関わる先端研究を展開しておられる方を講師にお迎えし、下記の内容で講演会を開催いたします。

### IQCE 量子化学探索講演会 2019 「量子化学で探る化学の最先端」

日時：令和元年11月8日（金）13:00～17:00

場所：東京大学本郷キャンパス 山上会館2階大会議室

主催：特定非営利活動法人量子化学探索研究所

協賛：（準備中）

講演会参加費：無料（懇親会は有料）

### <プログラム>

13:00 大野公一（IQCE 理事長）（開会挨拶）

13:10-13:35 前田 理（北海道大）

13:35-14:00 高石慎也（東北大）「水素分子錯体を利用した軽水素一重水素分離」

14:00-14:25 佐々木岳彦（東京大）「固定化イオン液体触媒の設計と反応機構解明」

14:25-14:40 横内優来（東北大（現：ダウ・東レ（株）））「GRRM プログラムを用いた多環式ケイ素化合物の多段階骨格変換反応の機構推定」

15:00-15:30 岩田末廣（慶応大）（特別講演）

「① 電子相関項に対する Counterpoise 法：結合エネルギーの過小評価、

② 水-水間水素結合の強さに対する第2、第3隣接分子の影響」

15:30-15:55 中村正人（日本大）「クラスターおよび PAH 分子と荷電粒子との衝突過程」

15:55-16:20 山崎馨（東北大）「生体関連分子の多段階無輻射失活過程」

16:20-16:45 高橋啓介（北海道大）「キャタリストインフォマティクスのコンセプトと実例：メタン酸化カップリング反応」

17:00-18:30 懇親会（山上会館地下会議室 001）

### <参加申込>

配布資料等の準備の都合がありますので、次の要領で、お申込ください。

参加申込締切：2019年11月1日（金）

申込方法：以下のページにアクセスしてお申込みください。

<https://sites.google.com/edu.k.u-tokyo.ac.jp/iqce2019>

・会場収容人数の関係で、予定人数に達した場合は、お断りすることがあります。

なるべくお早目にお申込みください。

- ・当日、会場に余裕がある場合は、予約なしで入場をお認めいたしますが、配布資料などの配布物の予備には限度がありますので、なるべく事前に参加お申込みください。

<懇親会参加費>

懇親会費：(事前 一般 4000 円 学生 3000 円、 当日 一般 5000 円 学生 4000 円)

懇親会事前申込締切： 2019年11月1日(金)

懇親会参加費振込期限：2019年11月5日(火)

(振込確認・領収書発行のため、期限までにお振込みください)

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)、山門英雄(和歌山大学)