

第5回 融合基礎・実習コース「理論・計算化学と錯体化学の接点」 開催報告

開催日 : 2017年10月27日(金)

開催場所 : 分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンター2階 小会議室

参加人数 : 33名

概要 : 10月27日(金)に首都大学東京理学研究科の今村 穰特任教授、京都大学触媒・電池元素戦略ユニットの福田良一特定准教授、名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所の土方 優助教を講師としてお招きし、融合基礎・実習コース「理論・計算化学と錯体化学の接点」を開催した。本コースは、分子科学研究所および新学術領域研究「配位アシンメトリ」が主催して開催し、学生や若手研究者を含む33名が参加した。

本コースのはじめには、新学術領域研究「配位アシンメトリ」領域代表の東京大学理学研究科・塩谷光彦先生に、本新学術領域研究の研究目的ならびに融合基礎・実習コースの目的についてご説明いただいた。首都大学東京・今村 穰先生からは、「密度汎関数理論の基礎概念と使い方」というタイトルで、密度汎関数理論の基礎定理、様々な汎関数の分類と特徴、基底関数、密度汎関数法の精度、時間依存密度汎関数理論(TD-DFT)などについて詳細な説明をしていただいた。京都大学・福田良一先生には、「円二色性分光の理論とスペクトルの帰属、電子状態と分子構造の非対称性」というタイトルで、円二色性分光の理論と基礎原理、励起状態の理論、旋光強度の特徴と計算方法、Gaussianプログラムを用いた光吸収スペクトルと円二色性の計算方法などの説明をしていただいた。名古屋大学・土方 優先生には、「理論・計算化学の機能性配位高分子への応用」というタイトルで、多孔性配位高分子(PCP/MOF)におけるCOやNO分子の選択的吸着のメカニズムや計算モデルとして有限モデルや無限骨格モデルを用いた実際の研究例を紹介していただいた。

講義はいずれも本新学術領域研究に深く関わる話題であり、基礎理論から最先端の研究を含む内容であった。参加者は、主に実験研究に携わっている学生や若手研究者が多かったが、理論化学の講義を熱心に受講し、多くの鋭い質問がなされた。今後、本新学術領域において、実験と理論の交流が益々深まり、優れた研究成果に繋がることを期待している。

文責 : 江原 正博



岡崎コンファレンスセンター前での講師と参加者の写真