



GAPによる機能性物質の 配座異性体の書き出し

講師： 脇 克志 先生（山形大学理学部理学科 教授）

日時： 7月31日（月） 16:30～17:30

場所： 名古屋市立大学 山の畑キャンパス 4号館3階 大講義室

概要

触媒など機能性物質を分子設計する場合、計算科学的手法によって機能の予測ができれば便利である。このためには、物質の分子構造を知っておく必要があるが、実験からは構造がわからない場合や、実験で求めた構造が変化して異なる構造で機能を発現する場合もある。このような場合には、機能を発現する分子構造を計算科学的手法により求めることが考えられるが、分子構造が複雑になるほど可能な配座異性体の数が多くなり、構造を求めることが困難になる。この問題を解決するために計算代数ソフトGAPを用いて、可能な配座異性体の書き出しを行い各異性体がどのような割合で存在するかを予想する。

連絡先：河田成人（内線5032）