

「分子軌道計算による化学反応の経路と相互作用」

講演者氏名	笛野博之
所属	京都大学工学研究科
講演タイトル	「分子軌道計算による化学反応の経路と相互作用」
講演概略	我々は、化学反応の道筋を非経験的分子軌道法により定め、反応過程を決定する分子間相互作用を求める計算を行っている。化学反応を、反応物、中間体、遷移状態、生成物などを結びそれらの間の構造変化を含む反応経路によりとらえると、平衡構造からだけではわからない新たな情報を得ることができる。以上についての例をあげるとともに、研究を進めるにあたって望まれる計算機環境についてもふれる。