

第324回 化学科コロキウムのご案内

「計算化学による反応機構解析と機械学習による予測」

畑中 美穂 准教授（慶応義塾大学理工学部）

日時： 2022年 12月8日（木） 16:20－17:50

場所： 8号館309室

概要

従来、計算化学による化学反応の解析では、決め打ちの反応座標を元に議論することが一般的であった。これを自動化したのが反応経路自動探索(GRRM)である。中でも、人工力誘起反応(AFIR)法は、反応に関わる原子群を指定するだけで、様々な生成物に至る経路を自動的に探索することを可能にした方法であり、触媒反応、酵素反応、表面反応、光反応など、様々な反応系の解析に応用されている。本講演では、丸岡触媒と酢酸銀のハイブリッド触媒系によるイサチン誘導体の不斉アルキニル化反応を例に、AFIR法を駆使した解析を紹介する。また、機械学習を利用した最近の試みも紹介する。

連絡先 東京都立大学 理学研究科 化学専攻 中谷直輝 内線3543 naokin@tmu.ac.jp