

第 48 回 鴨叡会・生命分子化学科セミナー

(第 11 回 機能分子設計化学セミナー)

講師：都築 誠二 先生 (産業技術総合研究所 機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター)

演題：分子軌道法を用いた分子間相互作用の解析

概要：*Ab initio* 分子軌道法や DFT 法は分子間相互作用を解析する実用的な手法になりつつある。ここでは分子間相互作用エネルギーの計算方法と計算精度について解説するとともに、CH/ π 、 π/π 相互作用などの弱い分子間相互作用の精密解析や超分子の相互作用の解析例などを紹介する。

日時：5月20日 (月曜日)

13時から (1時間程)

場所：6号館 第65講義室

多数の御来聴、

お待ちしております。

連絡先：沼田 宗典 (生命分子化学科 機能分子設計化学)

E-mail: numata@kpu.ac.jp, Phone: 703-5132