

2024年度分子研異分野技術交流セミナー（第5回） ～ NMR × 計算化学 ～

主催：文科省マテリアル先端リサーチインフラ **共催**：大学連携研究設備ネットワーク、NMR Club

日時：2024年10月25日（金）14:00～17:00

場所：分子科学研究所 研究棟 301 + Zoom meeting (ハイブリット)

プログラム：(講演 45分、質疑応答 15分; 休憩 10分)

14:00～15:00 実験・分析化学者のための量子化学計算入門～基礎知識から応用事例まで～

講師：本田 康 (HPC システムズ株式会社)

概要：

計算機の中で化学現象をシミュレートする量子化学計算は、幅広い分野でその重要性・有効性が認知され、利用されている一方、難しいと敬遠している研究者もまだまだ多いのではないのでしょうか。本セミナーでは、量子化学計算で何ができるのか、概要と特徴等を説明した後、化学分析における量子化学計算利用法の最新事例として、カロテノイド希少成分のHPLC定量分析法への応用を紹介します。本セミナーが、皆様が量子化学計算に少しでも興味を持っていただくためのきっかけの1つとなれば幸いです。



15:10～16:10 NMR 施設への計算化学の導入と定着

講師：杉村 夏彦 (早稲田大学)

概要：

早稲田大学・物性計測センターラボではNMR chemical shift predictionを行う目的で計算化学(量子化学計算)を導入しました。当初、計算環境の建造からの着手となりましたが意外にも低予算での建造に成功し、以降順調に発展してきました。分析センター、特に NMR と計算化学は利用者の相性が良かったと言えます。当施設での計算化学が定着した背景には NMR 室に設置することで合成系・反応開発系の研究室が有している計算化学への潜在的な需要と接触させることができた、常に相談できる人がいた、という要素があったと考えています。本演題では当施設での計算化学の導入と定着についてご紹介します。



16:10～17:00 講師を囲んでプチ交流会・計算科学研究センター見学等 (現地参加者のみ)

参加登録：下記サイトからご登録をお願いいたします。Zoom の URL とパスコードを配布いたします。

【登録フォーム】 <https://registration.ims.ac.jp/exchangeseminar1025>



定員：60 名程度 (現地参加：大学技術職員等、先着順に旅費支給あり)

締切：定員数に達し次第

お問い合わせ先：賀来 美恵 [mkaku_at_ims.ac.jp (at は@に変換してください)]