

Thu, Nov 7 2024

量子化学探索研究所 (IQCE) は、人類がかかえる様々な問題の解決に向けて量子化学に基づく探索研究を普及・発展させることを目的に 2013 年に発足し、シンポジウム開催や研究助成をはじめとして様々な事業に取り組んでおります。  
その活動の一環として、量子化学探索に関わる先端研究を展開しておられる方を講師にお迎えし、下記の内容で講演会を開催いたします。

日時: 2024 年 11 月 7 日 (木) 13:00 ~ 17:00

会場: 東京科学大学 大岡山キャンパス 西9号館 デジタル多目的ホール

主催 : 特定非営利活動法人量子化学探索研究所  
協賛 : 理論化学会、分子科学会、日本化学会、触媒学会、  
日本表面真空学会、有機合成化学協会

講演会参加費: 無料

IQCE 量子化学探索講演会

# 「量子化学で探る化学の最先端」

2024

プログラム:

13:00-13:10 開会挨拶 河野裕彦 (東北大学・IQCE理事長)

13:10-13:40 前田理 (北海道大学)

「GRRMプログラムの新展開2024」

13:40-14:00 三宅亮介 (お茶の水女子大学)

「柔軟なペプチドによる多様な金属錯体設計: 金属イオン配列制御から巨大構造形成まで」

14:00-14:20 菅野学 (東北大学)

「ポリヒドロキシフラレンからグラフェンフレークへの近赤外光誘起転換反応」

休憩

14:30-15:00 腰原伸也 (東京科学大学)

「光誘起相転移の現在と未来 - 光が生み出す電子的、構造的コヒーレンスはどこまで協同現象を制御できるのか? -」

15:00-15:20 原口亮介 (千葉工業大学)

「カチオン性ヘテロ環化合物の特殊な反応性」

15:20-15:40 村上龍大 (埼玉大学)

「リングポリマー分子動力学計算と機械学習解析による反応経路分岐機構の解明」

休憩

15:50-16:20 長谷川淳也 (北海道大学)

「反応機構をめぐるいくつかの話題」

16:20-16:40 堤拓朗 (北海道大学)

「高分子構造異性体の全列挙プログラムの開発と *in silico* スクリーニングに向けた高分子安定性評価」

16:40-16:55 Xi Yingxiao (東北大学・IQCE特別研究員)

「分子触媒効果を用いたCat-GRRM/MC/MD計算法による架橋ネットワーク高分子の生成プロセス解析と力学特性評価」

16:55-17:00 閉会挨拶

17:30-19:30 懇親会 東京科学大学 本館地下 コミュニティ&ワークラウンジ (先着60名)

参加申込

次の要領でお申込ください。

参加申込締切 : 2024 年 11 月 4 日 (月)

申込方法 : <https://sites.google.com/view/iqce2024>

・こちらのサイトから登録してください。講演会参加は無料です。

・懇親会 (先着60名) 会費: 4000円 (事前登録 11月4日まで振込) 当日払いは5000円。

実行委員 (世話人): 武次徹也、高柳敏幸、佐々木岳彦、山門英雄、山崎優一、原潤祐

<https://iqce.jp/>

事務局メールアドレス [iqce\\_office@iqce.jp](mailto:iqce_office@iqce.jp)

特定非営利活動法人  
量子化学探索研究所  
Institute for Quantum Chemical Exploration

