

第48回鴨叡会・生命分子化学科セミナー報告

日時：2019年5月20日（月）13:00～

場所：京都府立大学 65講義室

講師：都築 誠二 先生

「分子軌道法を用いた分子間相互作用の解析」

参加者：学部学生、大学院学生、教員

参加者総数：約20名

分子間相互作用を解析する実用的な手法である *Ab initio* 分子軌道法、DFT 法について基本事項から丁寧に講義していただいた。特に近年、超分子化学、有機材料化学の分野でその重要性が明らかとなっている CH/ π 、 π/π 相互作用などの分子間相互作用の計算方法やその精密解析手法など具体的な例を挙げながら解説していただいた。会場の学部学生・大学院生・教員から多くの質問があり、時間を超過して活発な議論がなされた。

(沼田 宗典)