

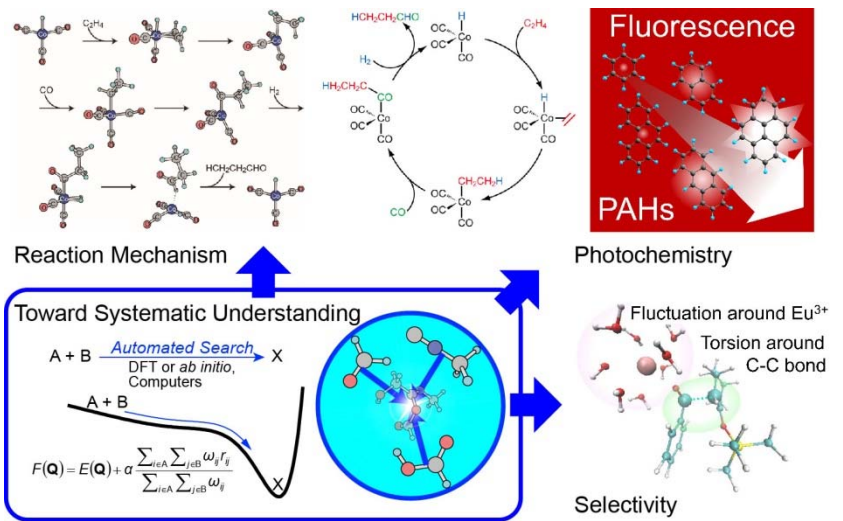
新任教授講演会

前田 理 先生

「理論的な反応経路自動探索 による化学反応の理解と設計」

日時 平成29年4月11日(火) 17:00~18:00

場所 北大 理学部7号館 310号室



化学反応の機構は、理論的な反応経路をコンピュータで調べることによって解明できる。反応経路をコンピュータに自動探索させることができれば非常に便利であるが、これは難しい課題であった。前田らは独自のアプローチで問題を解決し、反応経路自動探索法の開発に成功した。講演では本手法を用いた化学反応の機構解析と設計について解説し、今後の発展について展望する。

