

第290回 IBBセミナー

計算化学を活用した 小分子活性化反応の開発

美多 剛 教授

北海道大学 ICReDD



日時：2026年1月26日(月)
14:00～16:00
場所：22号館 1階 第2会議室

講演概要

本講演では、計算化学と有機合成化学の協奏によって実現した小分子活性化反応の新たな展開について紹介する。特に、CO₂、ギ酸塩、エチレン、ビシクロブタン、プロペランといった小分子を有用化合物へと転換するために、量子化学計算を用いた反応開発、なかでも反応経路自動探索法による予測や反応機構解析について述べる。

お問い合わせ：生体材料工学研究所
生命有機化学分野
細谷 孝充（内線：8117）

E-mail: thosoya.cb@tmd.ac.jp