

第4回量子生命科学セミナー

日時：2003年10月27日(月)15:00~16:30

場所：理学部B305室

講演題目： 計算化学 「予測」に賭けて

講演者： 平野 恒夫(お茶の水女子大学名誉教授・広島大学客員教授)

内容：

計算化学の使命は、未知の分子や反応を、実験に先駆けて予測することにあると考える。そのためには、新しい理論をつくりだすこと、新しいアルゴリズムを考えること、新しい計算手法を開拓することが肝要である。

今回は、重合反応の予測、分子性結晶の構造予測、ZnSeの光励起エピタクシャル成長機構、フラーレンやカーボンナノチューブの生成機構と新規生成方法の予測、そして、時間があれば未知星間分子の予測の話をしてみたいと思う。