

化学反応のポテンシャル曲面とダイナミクス

～加藤重樹先生の足跡をたどって～

開催趣意

本年3月31日、加藤重樹先生(京都大学理学研究科教授)がご逝去されました。

加藤先生は、さまざまな物質相で起こる化学反応現象の分子理論に関して、新規な方法論の開発を通して独創的かつ広範囲な貢献をされました。特に、化学反応の分子機構とダイナミクスの研究において、非経験的分子軌道法を用いた電子状態理論に基づき、複雑なポテンシャルエネルギー面とその上のダイナミクスを簡便に解析することを可能にする力学・量子力学的理論、及び反応物質を取り囲む無数の溶媒・タンパク質分子の効果を適切に取り入れる統計力学的理論を開発することにより、理論化学分野に大きな足跡を残されました。

本シンポジウムでは、加藤先生の多大なご功績の足跡をたどりつつ、往時の研究状況から今日に到るまでの化学反応ダイナミクス研究の発展について概観し、今後の展望を議論したいと思います。

プログラム

午前の部

- 10:30 - 10:35 **Opening Remarks**
座長 中野 晴之
大峯 巖(分子研)
「水の変化と反応」
- 10:35 - 10:50 山本 武志(京都大)
「反応経路・反応表面ハミルトニアンの研究:気相から凝縮相への道のり」
- 10:50 - 11:05 **Break**
- 11:05 - 11:15 座長 中村 恒夫
高塚 和夫(東京大)
「偉大な量子化学の発展と今後」
- 11:15 - 11:30 田代 基慶(分子研)
「星間分子の解離ダイナミクスから光電離まで」
- 11:30 - 11:45 本間 健二(兵庫県立大)
「電子状態と反応性 — 遷移金属原子の反応ダイナミクス」

午後の部

- 13:00 - 13:15 座長 天辰 禎晃
山崎 祥平(北海道大)
「核酸塩基と円錐交差」
- 13:15 - 13:30 石田 俊正(京都大)
「ペニングイオン化の理論的研究」
- 13:30 - 13:40 **Break**
- 13:40 - 13:55 座長 佐藤 啓文
山邊 信一(奈良教育大)
「有機化学反応のポテンシャル曲面での水素結合の役割」
- 13:55 - 14:10 平田 文男(分子研)
「RISM-SCF 理論の開発と発展～RISM-SCF 理論誕生秘話～」
- 14:10 - 14:15 **Closing Remarks**

世話人

中野晴之 安藤耕司 佐藤啓文
林重彦 山本武志 吉田紀生 井内哲

