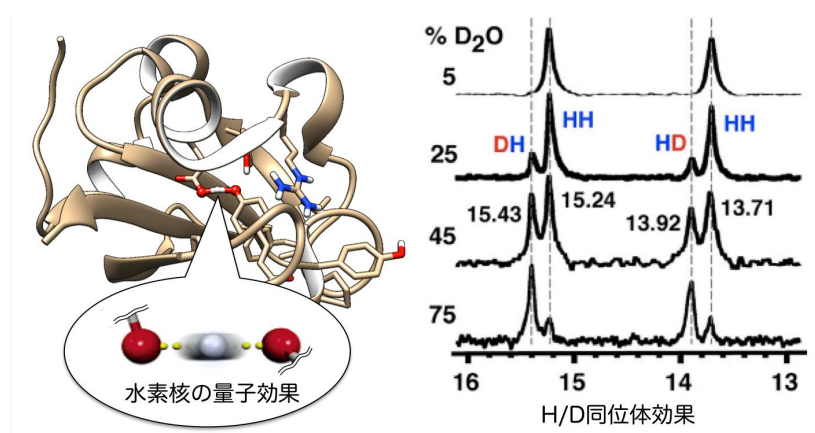


計算科学コロキウム

生体分子に現れる水素原子核の量子効果の解析

兼松 佑典 博士

広島市立大学 大学院情報科学研究科



要旨

水素原子核の量子効果はしばしば分子物性に重要な影響を与え、特に強い水素結合系を重水素置換した際に H/D 同位体効果として実験観測値に顕在化し、系の局所構造に関する詳細な知見を提供してくれる。

本発表では生体分子に現れる水素原子核の量子効果について、核の量子性を効率的に取り込んだ電子状態計算手法として我々が開発してきた、多成分系分子軌道 (MC_MO) 法によって解析した事例と、MC_MO 法の今後の展望について紹介する。

日時： 2019/1/30(水) 17:00~17:30

場所： 筑波大学計算科学研究センター 会議室 A

参加費： 無料