

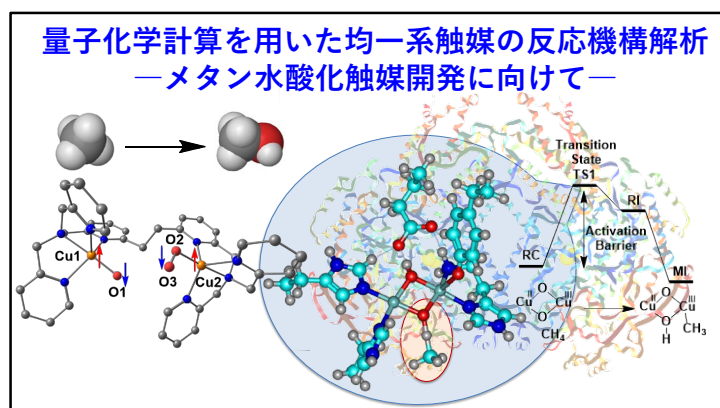
主催：筑波大学計算科学研究センター

## 計算科学コロキウム

### 量子化学計算を用いた均一系触媒の反応機構解析 —メタン水酸化触媒開発に向けて—

堀 優太 博士

九州大学先導物質化学研究所 吉澤研究室



量子化学計算により、錯体・酵素で起こる触媒反応中の不安定中間体、遷移状態の構造やそのエネルギーから反応機構の詳細が明らかにできる。本発表では、メタン水酸化酵素の活性中心に注目した金属オキソ錯体を取り上げ、メタン水酸化の反応機構解析とその触媒性能の理論的予測を行った研究について紹介する。また、実験との共同研究により行った触媒開発に向けた理論解析について発表する。

日時： 2019/1/30(水) 18:00~18:30

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