



第164回触媒化学研究センター談話会

演 題: 遷移金属カルコゲニドクラスターの合成と利用

講演者: 溝部裕司 教授 (東京大学生産技術研究所)

要 旨: 遷移金属-硫黄多核構造は酵素活性部位に広く存在することが知られ、その適切なモデル化合物を設計・合成することは、温和な条件下に進行する高効率触媒反応の開発につながる。ここでは、硫黄、セレンなどを架橋配位子にもつ遷移金属多核構造の合理的な構築法と、得られた多核錯体の反応性について当研究室で最近見いだした知見について。

演 題: 量子化学計算による生物無機化学への
アプローチ

講演者: 吉澤一成 教授 (九州大学先導物質化学研究所)

要 旨: 生体化学反応には遷移金属イオンが関与している。優れた密度汎関数法のプログラム開発とコンピューターの性能向上とにより量子化学計算から生物無機化学にアプローチすることが可能になりつつある。量子化学計算では実験で捕捉することの困難な不安定中間体や遷移状態の構造やエネルギーを容易に求めることができる。今回は生体化学反応の反応過程について。

日 時: 2004年2月13日(金) 15:30 - 17:30

会 場: 北海道大学創成科学研究棟
4階セミナー室 4 - 213号室

(連絡先) 北大触媒化学研究センター 分子集合体化学分野
辻 康之 (TEL:706-9155)