

2019年度第1回 提案公募型セミナー

国際シンポジウム

量子化学による分光分析の高精度化

主催 (公社)日本分析化学会近畿支部 近畿分析技術研究懇話会
共催 近畿大学総合理工学研究科

分光分析化学において、スペクトルの帰属はその分析の信頼性を担保する上で重要なテーマです。量子化学計算によるスペクトルシミュレーションを用いた実験スペクトルの帰属は単一分子系では専門家でなくても、ソフトウェアを用いることで可能になってきました。その発展は分析化学者も注目に値する分野となっていました。近赤外における倍音振動遷移や、紫外・遠紫外における電子遷移における実験化学者も用いることができる計算手法や、非調和性や水素結合を考慮した最先端のシミュレーション手法について、この分野における最先端の研究者であります、ポーランド ヤゲロニアン大学 Marek J. Wojcik 教授を迎え、さらには国内の気鋭の研究者によるセミナーを行いたいと思います。

場所: 近畿大学東大阪キャンパス ブロッサムカフェ
大阪府東大阪市小若江3-4-1

日時: 2019年7月24日(水) 13時30~17時30分

会費: 無料

主催: (公社)日本分析化学会近畿支部 近畿分析技術研究懇話会

共催: 近畿大学総合理工学研究科

プログラム

13:30-13:35 開会の挨拶 近畿大学 森澤勇介

13:35-14:30 ヤゲロニアン大学 Marek J. Wojcik
「Vibrational Spectroscopy of Hydrogen-Bonded
Complexes, Liquids and Solids(仮題)」

14:30-15:25 関西学院大学 尾崎 幸洋
「近赤外領域における倍音のスペクトルシミュレーション(仮題)」

<休憩>

15:35-16:30 理化学研究所 八木 清

「ローカル X-H 伸縮モードを用いた高振動励起状態の計算」

16:30-17:25 近畿大学 森澤 勇介

「量子化学計算を用いた減衰全反射遠紫外分光法のスペクトル帰属」

17:25-17:30 閉会の挨拶 関西学院大学 尾崎 幸洋

申込方法

標記行事名を題記し、E-mail で、1)氏名、2)勤務先(所属)、3)連絡先(E-mail、TEL、FAX) を明記のうえ、下記宛てにお申し込みください。

参加証は発行しませんので、直接会場にお越し下さい。

問合・申込先

近畿大学理工学部理学科化学コース 森澤 勇介

〒577-8502 大阪府東大阪市小若江 3-4-1 [電話：06-4307-3410、E-mail：
morisawa@chem.kindai.ac.jp]