

Symposium (Oral) | Symposium : Research paradigm shift by AI and robotics

📅 Thu. Sep 19, 2024 1:30 PM - 5:05 PM JST | Thu. Sep 19, 2024 4:30 AM - 8:05 AM UTC 🏢 A21 (TOKI MESSE 2F)

[19p-A21-1~5] Research paradigm shift by AI and robotics

Toyohiro Chikyo(NIMS), Shigetaka Tomiya(NAIST)

2:10 PM - 2:50 PM JST | 5:10 AM - 5:50 AM UTC

[19p-A21-2] Accumulating and analyzing reaction path networks: Toward the discovery of chemical reactions

○Yu Harabuchi^{1,2} (1.WPI-ICReDD, 2.JST-ERATO)

Keywords : quantum chemical calculation、reaction path search、reaction path network

近年、量子化学計算に基づく反応経路探索法の発展に伴い、分子の安定構造が多数の反応経路によって網目状につながれた反応経路ネットワークの構築と、それを用いた反応機構解析が可能になってきた。本講演では、大規模な反応経路ネットワークデータに対する情報学的手法を利用した化学反応解析、および反応経路ネットワークに基づく有機合成反応開発への展開について、最近の取り組みを紹介する。