

# 第4回 SPERC 計算化学講演会 兼 第5回 岩手量子化学計算講演会

## テーマ：AIと有機化学

主催：岩手大学理工学部附属ソフトパス理工学研究センター  
(SPERC) 計算化学主導分子創製研究グループ  
岩手量子化学計算研究会

後援：日本化学会東北支部、有機合成化学協会東北支部

日時：2023年1月18日(水) 15:00～17:00

会場：復興祈念 銀河ホール（岩手大学 理工学部）

参加費：無料（どなたでも参加できます）

### プログラム

15:00～15:05 趣旨説明

SPERC 計算化学Gr代表 是永 敏伸（化学コース 教授）

15:05～15:30 本学学生による活動報告

新井田 駿介 氏（化学コース 是永研 修士1年）

今野 圭祐 氏（知能・メディア情報コース 山中研 修士1年）

「機械学習によるホスフィン配位子の性質評価」

15:40～17:00 招待講演

笹野 裕介 先生（東北大学 薬学部 講師）

「化学/立体選択的反応の開発と計算機の活用」



### 招待講演者のご紹介

笹野先生は、有用な有機分子触媒の一つであるAZADO及びその類縁体の研究で多くの研究業績を挙げられており、有機分子触媒分野における若手のホープの一人です。また、学術変革研究の「デジタル有機合成」において計画班をご担当されていることから、今回、計算化学及びAIによる有機合成化学について、お話しいただきます。