



2017年度 教室セミナー (第31回有機化学セミナー)

『CAST/CNMRシステムの開発と構造訂正研究への応用』

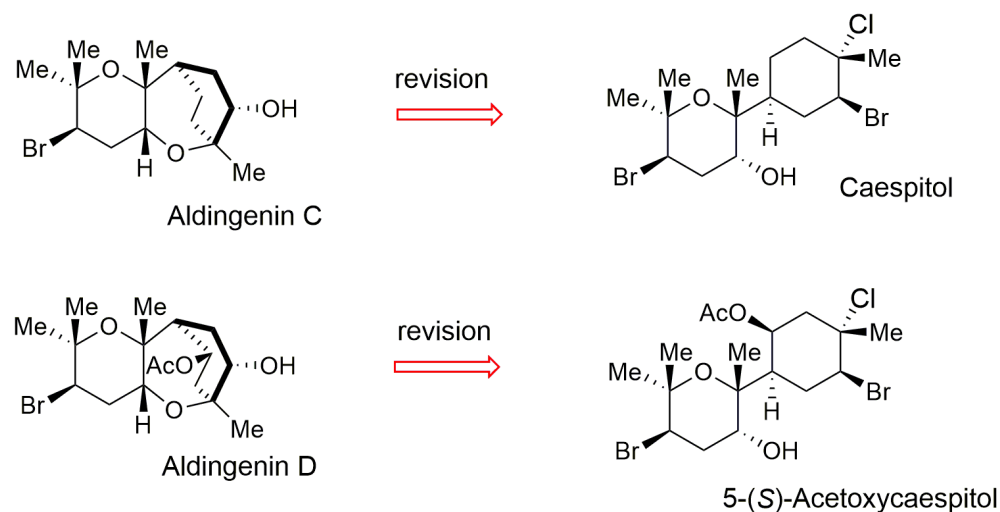
講師：越野 広雪 博士

(理化学研究所 分子構造解析ユニット・ユニットリーダー)

場所： 理学系研究棟会議室 (118号室)

日時： 2017年10月30日 (月) 16:30~18:00

CAST/CNMRシステムは立体化学を考慮したデータベースを用いて、クエリーの化学構造式に対し ^{13}C NMRの化学シフト値を予測し、 ^{13}C NMRデータに対して部分構造検索と構造推定を行うコンピュータシステムです。データベースの質は予測結果に影響を与えるので登録するデータは十分に評価する必要があります。越野先生の研究グループでは、天然有機化合物を中心に構造解析の論文データを評価する過程で、これまでに数多くの構造の誤りを見出してきました。本セミナーでは、化学構造と ^{13}C NMRデータの評価、構造の誤りの発見と訂正に関して、その詳細を解説いただきます。



連絡先：物質科学コース 創薬有機化学研究室
及川雅人 (内線2403)