



## 10. キーワード

- |              |          |              |       |
|--------------|----------|--------------|-------|
| (1) 自動反応経路探索 | (2) 不斉触媒 | (3) 人工力誘起反応法 | (4)   |
| _____        | _____    | _____        | _____ |
| (5)          | (6)      | (7)          | (8)   |
| _____        | _____    | _____        | _____ |

## 11. 現在までの進捗状況

( 区分 )

( 理由 )

29年度が最終年度であるため、記入しない。

## 12. 今後の研究の推進方策

( 今後の推進方策 )

29年度が最終年度であるため、記入しない。

## 13. 研究発表 (平成29年度の研究成果)

〔雑誌論文〕 計(0)件/うち査読付論文 計(0)件/うち国際共著論文 計(0)件/うちオープンアクセス 計(0)件

著者名		論文標題				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
オープンアクセス						

〔学会発表〕 計(3)件/うち招待講演 計(2)件/うち国際学会 計(1)件

発表者名	発表標題	
畑中美穂	自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と機械学習による解析	
学会等名	発表年月日	発表場所
第11回 革新的量子化学シンポジウム (招待講演)	2017年05月13日	京都キャンパスプラザ (京都府京都市)

発表者名	発表標題	
畑中美穂、日下部彩、青木伸	不斉亜鉛触媒を用いるアルドール反応の立体選択性発現機構	
学会等名	発表年月日	発表場所
第20回 理論化学討論会	2017年05月16日 ~ 2017年05月18日	京都大学時計台国際交流ホール (京都府京都市)

発表者名	発表標題	
Miho Hatanaka	Global Reaction Route Mapping Study on Asymmetric C-C Bond Formation	
学会等名	発表年月日	発表場所
4th Challenges in Computational Homogeneous Catalysis (招待講演)(国際学会)	2017年06月15日 ~ 2017年06月16日	Nasby Slott, Stockholm, Sweden

〔図書〕 計(0)件

著者名	出版社		
書名	発行年	総ページ数	

## 14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出願〕 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取得〕 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

## 15. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計(0)件

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

16. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

( 1 ) 国際共同研究 : -

17. 備考

--