



日本農芸化学会 2019 年度大会 ランチョンセミナー LS1-1

日時：3月24日(日) 12:30 ~ 13:20

場所：C1会場
東京農業大学 世田谷キャンパス 1号館 3F 331

Spartan'18 For windows, Macintosh and Linux

- ・Spartan(スパルタン)は、最新式の可視化機能と強力な計算エンジンを装備した、安価で使いやすい分子モデリングソフトウェアです。
- ・今回リリースした Spartan'18 では、特に ^{13}C NMR 化学シフトの再現性を強化、DFT 計算結果を経験的補正を加え、さらに 1600 を超える天然物データと比較検証することで平均誤差 2-3ppm を実現しました。
- ・本ランチョンセミナーでは、 ^{13}C NMR 化学シフトの計算を中心に、Spartan'18 を紹介します。

1. 【Spartan'18 のご紹介】

Wavefunction, Inc. 渡邊 裕介

2. 【Spartan'18 による天然物の ^{13}C 化学シフト計算：改良点と応用】



弘前大学 橋本 勝 先生

農学生命科学部 分子生命科学科 教授