

2-ピリドン誘導体のヘテロ分子間会合に及ぼす置換基効果(2)―分子動力学による検討―

(日化大工・日本化学基礎研)○日化一郎・日化二郎・勅使河原竜三郎・SMITH J. P.・陳 美齡

(Univ. of Japan Chemical, Japan Chemical Co.Ltd.)○NIKKA, Ichiro; NIKKA, Jiro; TESHIGAWARA, Ryuzaburou; SMITH, J.P.;CHEN, Myeirin

それぞれ3-位および6-位に側鎖置換基をもつ一対の2-ピリドン誘導体のヘテロ分子間会合体の安定性に対する置換基効果を、全エネルギー分布を考慮した分子動力学(TEDMD)法により検討した。各側鎖の長さの和が6原子より大きい場合にはヘテロ会合体の側鎖は互いに相互作用することができ、置換基の組み合わせにより．．．．

．．．．．

予稿原稿作成上の注意事項

用紙設定 : A4判 縦

余白 : 上下30mm、左右30mm

講演番号欄 : 有効範囲の左上、幅40mm 高さ15mmの部分を空けて下さい。

作成頁数 : 1 頁

色 : カラーも可能です

wordファイルとpdf ファイルの両方をメール送信してください。