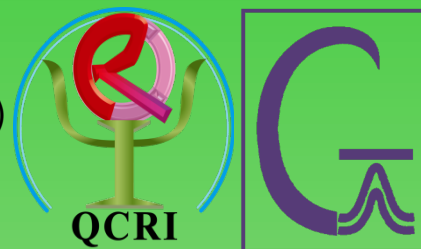


第二回 Gaussian/SAC-CI講習会

分子軌道法の基礎からSAC-CI法による光励起状態の研究の仕方まで：
超一流の講師陣に学ぶ

主催 Quantum Chemistry Research Institute (QCRI),
Quantum Chemistry Research & Development (QCRD)

後援 Gaussian Inc. USA



日時 2010年8月12日(木), 13日(金)

場所 キャンパスプラザ京都 (JR京都駅北口をJR沿い西へ徒歩5分)

講師 中辻博 江原正博 長谷川淳也 福田良一 宮原友夫 中嶋浩之 黒川悠素

参加費 企業参加 5万円, アカデミック 3万円, 学生 2万円

懇親会費 4500円

第二回 Gaussian/SAC-CI 講習会スケジュール表

1日目(8月12日)

	10:30	12:00	1:00	3:00	3:30	5:30
各 Topic について、15-20 分 程の説明のあと、演習	<ul style="list-style-type: none"> 計算環境の設定 本講習の目指すところ <p style="text-align: right;">中辻</p> <p><u>Gaussian とは</u> 長谷川・宮原・中嶋</p> <ul style="list-style-type: none"> 分子軌道法 進んだ方法 DFT 計算演習 	<p><u>SAC-CI 法と計算化学</u> 中辻</p> <p><u>SAC-CI 法の計算演習</u></p> <p style="text-align: center;">中辻・宮原・中嶋</p> <ul style="list-style-type: none"> H₂O の基底、1・3 重項励起、イオン化、アニオン化状態 Full-CI・SECI との比較 基底関数の選択の重要性 価電子状態と Rydberg 励起 <p><u>SAC-CI Keyword の説明</u></p> <ul style="list-style-type: none"> SAC-CI 計算の考え方 	<p><u>エチレンの SAC-CI 演習</u> 中嶋</p> <ul style="list-style-type: none"> SAC-CI 計算の進め方と整理法 <p><u>ポルフィリンとテトラザポルフィリンの化学 – 生物と材料の基礎</u> 福田・宮原</p> <ul style="list-style-type: none"> 色素設計：Q-Band の吸収強度 構造緩和とエネルギー移動 <p><u>GaussView のデモ</u> 黒川</p> <ul style="list-style-type: none"> 座標の入力と分子軌道の図示 			

2日目(8月13日)

	9:00	10:30	10:30	12:00	1:00	3:00	3:00	5:00
<p><u>光材料設計の計算化学</u> 江原・福田</p> <p><u>基底・励起状態の構造最適化</u></p> <ul style="list-style-type: none"> SAC-CI グラディエント法 Keyword の説明 H₂CO を用いた演習 <p><u>金属化合物の励起スペクトルとイオン化スペクトル</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 金属の軌道の柔らかさ Mo 錯体を用いた演習 	<p><u>金属表面の DAM と触媒作用</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 酸素分子の解離吸着と演習 表面光化学 <p><u>発光分子の計算化学</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 有機 EL 化合物の設計と演習 <p>(advanced コース入門講演)</p> <p><u>内殻電子のサイエンス</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 内殻電子の励起とイオン化 サテライト・スペクトル 温度効果 	<p>(advanced コース入門講演)</p> <p><u>光合成バクテリアの量子化学</u></p> <p style="text-align: right;">中辻</p> <p><u>光機能性蛋白質の計算科学</u> 長谷川・宮原</p> <ul style="list-style-type: none"> SAC-CI による QM/MM 視物質ロドプシン (レチナール) の光吸収波長制御メカニズム 計算演習 	<p><u>蛍光蛋白質における生物発光</u> 長谷川・宮原</p> <ul style="list-style-type: none"> オワンクラゲ由来 GFP の緑色蛍光と DsRed の赤色蛍光 <p><u>CD・UV スペクトルと DNA</u> 宮原・中嶋</p> <ul style="list-style-type: none"> CD (円二色性)スペクトルと計算演習 DNA のらせん構造 <p><u>終わりに</u> 中辻</p>					

申し込み方法 <http://qcri.or.jp/> にある参加申込書に記入し、
y.itoh @ qcri.or.jp に添付・送信ください。折り返しご連絡申し上げます。