

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」

1 日目(8月12日)

10:30 12:00 1:00 3:00 3:30 5:30 6:00 8:30

各 Topic について、15-20 分 程の説明のあと、演習	・計算環境の設定 <u>本講習の目指すところ</u> 中辻	<u>SAC-CI 法と計算化学</u> 中辻 <u>SAC-CI 法の計算演習</u> 中辻・宮原・中嶋	<u>エチレンの SAC-CI 演習</u> 中嶋 ・SAC-CI 計算の進め方と整理法 <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 ・色素設計：Q-Band の吸収強度 ・構造緩和とエネルギー移動 <u>GaussView のデモ</u> 黒川 ・座標の入力と分子軌道の図示	懇親会 中辻 江原 長谷川
	Gaussian とは 長谷川・宮原・中嶋	・H <sub>2</sub> O 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 <u>SAC-CI Keyword の説明</u> ・SAC-CI 計算の考え方		

2 日目(8月13日)

9:00 10:30 10:30 12:00 1:00 3:00 3:00 5:00

<u>光材料設計の計算化学</u> 江原・福田 <u>基底・励起状態の構造最適化</u> ・SAC-CI グラディエント法 ・Keyword の説明 ・H <sub>2</sub> CO を用いた演習	<u>金属表面の DAM と触媒作用</u> ・酸素分子の解離吸着と演習 ・表面光化学 <u>発光分子の計算化学</u> ・有機 EL 化合物の設計と演習 (advanced コース入門講演) <u>内殻電子のサイエンス</u> ・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	(advanced コース入門講演) <u>光合成バクテリアの量子化学</u> 中辻 <u>光機能性蛋白質の計算科学</u> 長谷川・宮原 ・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	<u>蛍光蛋白質における生物発光</u> 長谷川・宮原 ・オワンクラゲ由来 GFP の緑色蛍光と DsRed の赤色蛍光 <u>CD・UV スペクトルと DNA</u> 宮原・中嶋 ・CD (円二色性)スペクトルと計算演習 ・DNA のらせん構造 <u>終わりに</u> 中辻
<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> ・金属の軌道の柔らかさ ・Mo 錯体を用いた演習			