Gaussian/SAC-CI 講習会

主催：量子化学研究協会(QCRI)・量子化学研究開発(QCRD)
後援：Gaussian Inc.(USA)

計算化学の飛躍的な進歩と信頼性の向上とともに、量子化学計算を研究開発の指針作りや日常の道具として利用する研究者が増えてきました。本講習会では、Gaussian とその中に含まれている SAC-CI プログラムを使って、分子と光がもたらす幅広い科学と化学を、分子軌道法と SAC-CI 法を使って研究する方法を豊富な演習を交えて講述します。

Gaussian プログラムはご存知の通り、世界最大のシェアをもつ汎用量子化学プログラムパッケージであり、経験的手法から DFT、そして高度な ab initio 計算までカバーしており、原子・分子の化学と物理を理論的に研究したり解明したりするためには欠かせないプログラムパッケージです。SAC-CI 法はこの Gaussian に搭載され、光と分子の励起状態が絡む幅広い科学を研究するための信頼度の高い量子化学理論です。本講習会では、Gaussian と SAC-CI 法を利用して、分子の励起状態やイオン化状態の科学と化学を研究しようとする方、これを光材料の開発や設計に活用しようとお考えの方、また、生物の光機能の仕組みの解明やその利用に応用しようと考えておられる方、などを対象に、計算法の基となる量子化学理論から分かりやすく解説し、理論に基づく正しい計算法とノウハウを、実際の演習と共に講述します。講師陣には SAC-CI 法の提案者と開発者を迎え、高レベルでありながら分かりやすい講習を行います。また、懇親会では講習中に質問できなかったことを講師に質問できる場や参加者同士の交流を深められるアットホームな場を提供しますので、講習会と併せて是非ご参加ください。実施の要領は次の通りです。

時：2010 年 6 月 10 日 am10:30 – 11 日 pm 5:00 迄（懇親会：6 月 10 日 pm 6:00 から）

場所：キャンパスプラザ京都第一会議室とホール(２階)（ＪＲ京都駅北口を JR 沿い西へ徒歩５分位)

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

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。講習会のプログラムや、その他の詳細についても、この URL をご覧ください。

主催：量子化学研究協会(QCRI)・量子化学研究開発(QCRD)
代表：中辻　博
615-8245 京都市西京区御陵大原 1-36
京大桂ベンチャープラザ北館
Tel,fax,e-mail: 075-634-3211, h.nakatsuji AT qcri.or.jp
web site：www.qcri.or.jp