

# Gaussian/SAC-CI講習会(東京)

SAC-CI法による光・電子過程の信頼できる計算

主催 量子化学研究協会研究所(QCRI)  
後援 Gaussian Inc. (USA)



日時 2010年 11月4日(木), 5日(金)

場所 JST研究開発戦略センター  
(東京メトロ有楽町線「麴町駅」5番出口より徒歩1分)

講師 中辻博 波田雅彦 長谷川淳也 宮原友夫 中嶋浩之 本田康 黒川悠索  
参加費 企業参加 7万円, アカデミック 4万円, 学生 2万円  
懇親会費 5000円

Gaussian/SAC-CI 講習会(東京): 「SAC-CI 法による光・電子過程の信頼できる計算」

1日目(11月4日)

10:30 12:00 1:00 3:00 3:30 5:30 6:00 20:30

<p>・ 計算環境の設定 本講習の目指すところ 中辻</p> <p><u>SAC-CI 法と計算化学</u> 中辻</p> <p>・ 分子軌道法 ・ SAC 法 ・ SAC-CI 法 ・ HF/SECI 法の電子相関理論 としての SAC/SAC-CI 法</p>	<p><u>SAC-CI 法の計算演習</u> 中辻・宮原・中嶋</p> <p>・ 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</p> <p><u>SAC-CI Keyword の説明</u> 宮原</p> <p>・ SAC-CI 計算の考え方 <u>エチレンの SAC-CI 演習</u> 中嶋</p> <p>・ SAC-CI 計算の進め方と整理法</p>	<p>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 宮原・中辻</p> <p>・ 色素設計: Q-Band の吸収強度 ・ 構造緩和とエネルギー移動</p> <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> 中辻・黒川・中嶋</p> <p>・ 金属の軌道の柔らかさ ・ Mo 錯体を用いた演習 ・ NMR 化学シフトとの関連</p>	<p>懇親会 中辻・波田</p>
--	---	---	----------------------

2日目(11月5日)

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

<p><u>基底・励起状態の構造最適化</u> 長谷川・宮原</p> <p>・ 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</p> <p><u>ヘム及びヘムタンパクの常磁性 <sup>13</sup>C-N MR スペクトル</u> 波田</p> <p>・ 電子スピン密度と常磁性 NMR ・ ヘムのモデル化 ・ モデル分子を用いた演習</p>	<p><u>光合成バクテリアの量子化学</u> 中辻</p> <p><u>光機能性蛋白質の計算科学</u> 長谷川・宮原</p> <p>・ 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>	<p><u>CD・UV スペクトルと DNA</u> 宮原</p> <p>・ CD (円二色性)スペクトルと 計算演習 ・ DNA のらせん構造 <u>Ni サレン分子の CD スペクトル</u> 波田</p> <p>・ 配位構造と CD スペクトル ・ 計算演習 <u>アミノ酸とアミノ酸薄膜の CD スペクトル</u> 本田・波田</p> <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](mailto: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。