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　黒川悠索

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 1 2 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

・計算環境の設定

本講習の目指すところ　中辻

Gaussian とは　長谷川・宮原・中嶋

・分子軌道法
・進んだ方法
・DFT
・計算演習

SAC-CI 法と計算化学　中辻

SAC-CI 法の計算演習　中辻・宮原・中嶋

・H_2O 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

SAC-CI Keyword の説明

・SAC-CI 計算の考え方

エチレンの SAC-CI 演習　中嶋

・SAC-CI 計算の進め方と整理法

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　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

GaussView のデモ　黒川

・座標の入力と分子軌道の図示

2 日目(8 月 1 3 日)

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

光材料設計の計算化学　江原・福田

基底・励起状態の構造最適化

・SAC-CI グラディエント法
・Keyword の説明
・H_2CO を用いた演習

金属化合物の励起スペクトルとイオン化スペクトル

・金属の軌道の柔らかさ
・Mo 錯体を用いた演習

金属表面の DAM と触媒作用

・酸素分子の解離吸着と演習
・表面光化学

発光分子の計算化学

・有機 EL 化合物の設計と演習

(advanced コース入門講演)

内殻電子のサイエンス

・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)

光合成バクテリアの量子化学　中辻

光機能性蛋白質の計算科学　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

蛍光蛋白質における生物発光　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

CD・UV スペクトルと DNA　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

終わりに　中辻

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。