Gaussian/SAC-CI 講習会

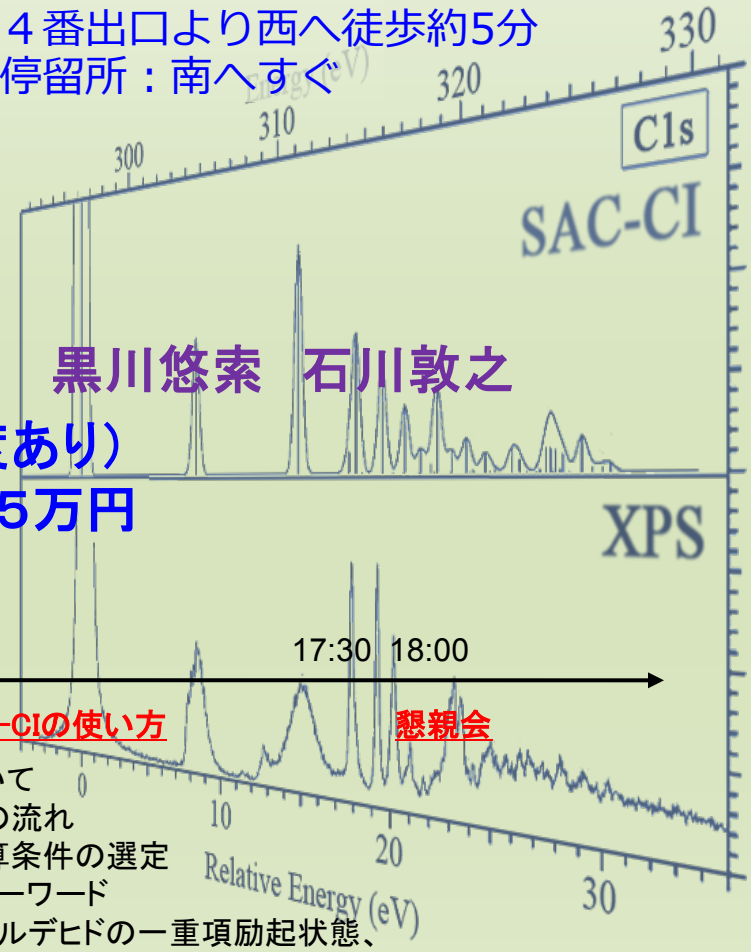
SAC-CIで論文を書こう！　基礎理論から実際の研究まで

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

日時　2011年 10月6日(木), 7日(金)

場所　京都テルサ　東館3階　B･C会議室
http://www.kyoto-terrsa.or.jp/

ＪＲ京都駅：　八条口より南へ徒歩約15分
近鉄東寺駅：　東へ徒歩約5分
地下鉄九条駅：４番出口より西へ徒歩約5分
市バス九条車庫停留所：南へすぐ



講師　中辻 博　本田 康　宮原友夫　中嶋浩之　黒川悠索　石川敦之

参加費　学生2万円（成績優秀者への奨学金制度あり）
アカデミック関係者 3万円　企業･一般 5万円

１日目(１０月６日)

10:30 — 11:45 — 12:45 — 14:00 — 14:30 — 17:30 — 18:00

本講習の目指すところ

SAC-CI法のあらまし

- 分子軌道法
- SAC/SAC-CI法とは？
- SAC/SAC-CI法で何ができるか？
- TDDFTとの違いは？
- 研究例･トピックの紹介

SAC/SAC-CI理論

- Hartree-Fock近似とその性質
- 電子相関とその計算方法
- SAC方程式とその解法
- 励起状態とその性質
- Brillouin定理とその一般化
- SAC-CI方程式とその解法
- SAC/SAC-CI計算における大まかな流れ

Gaussian版SAC-CIの使い方

- Gaussianについて
- Gaussian計算の流れ
- 準備計算と計算条件の選定
- SAC-CI重要キーワード
- 実習：ホルムアルデヒドの一重項励起状態、三重項励起状態、イオン化基底･励起状態、電子付加基底･励起状態（出力ファイルの見方、分子軌道の取扱、電子状態の帰属、TDDFT計算との比較）

懇親会

２日目(１０月７日)

9:00 — 10:00 — 10:15 — 11:45 — 12:45 — 15:45 — 16:00 — 17:00

SAC-CIで論文を書こう！

- SAC-CI計算に適したテーマ選択について
- 論文実績の紹介
- SAC-CI計算論文の書き方についての解説
- 実習テーマの選択（フランとチオフェンの励起スペクトル or ベンゾキノンのイオン化スペクトル）

SAC-CI計算の前に

- まず研究計画を練ろう
- 自分の選択テーマに対する研究計画の作成演習
- 分子軌道の取扱、分子構造最適化、基底関数の選択（復習内容を含む）
- SAC-CIの準備計算

各テーマの実習

- 入力ストリームの作成
- 計算スペクトルの作成
- Summary Tableの作成
- TDDFT計算との比較
- 電子状態の帰属
- 考察

論文執筆実習

- 午前中の解説を踏まえて、各セクションで書くべき内容をまとめる

終わりに

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 宛に添付･送信ください。e-mailにて、折り返しご連絡申し上げます。