

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(1 1 月 4 日)

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

・ 計算環境の設定
本講習の目指すところ
 中辻
SAC-CI 法と計算化学
 中辻
 ・ 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

SAC-CI 法の計算演習
 中辻・宮原・中嶋
 ・ H₂O 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 宮原
 ・ 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
 イリンの化学 – 生物と材料の
 基礎 宮原・中辻
 ・ 色素設計：Q-Band の吸収強度
 ・ 構造緩和とエネルギー移動
金属化合物の励起スペクトルと
 イオン化スペクトル
 中辻・黒川・中嶋
 ・ 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

懇親会
 中辻・波田

2 日目(1 1 月 5 日)

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

基底・励起状態の構造最適化
 長谷川・宮原
 ・ SAC-CI グラディエント法
 ・ Keyword の説明
 ・ H₂CO を用いた演習
ヘム及びヘムタンパクの常磁性 13C-N
 MR スペクトル 波田
 ・ 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

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

CD・UV スペクトルと DNA
 宮原
 ・ CD (円二色性)スペクトルと
 計算演習
 ・ DNA のらせん構造
Ni サレン分子の CD スペクトル
 波田
 ・ 配位構造と CD スペクトル
 ・ 計算演習
アミノ酸とアミノ酸薄膜の CD
 スペクトル 本田・波田
 ・
終わりに 中辻