

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  
 ・ 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  
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  
 ・ H<sub>2</sub>CO 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