

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」

1日目(6月10日)

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

		各 Topic について、15-20 分 程の説明のあと、演習	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 ・計算環境設定と実習 ・進んだ方法 ・DFT ・計算演習 ・Gauss View による図示	SAC-CI とは 中辻・中嶋・宮原 ・H ₂ O の基底、1 重項・3 重項励起、イオン化、アニオン化状態の計算演習 ・Full-CI・SECI との比較 基底関数の選択の重要性と演習 ・価電子状態と Rydberg 励起 ・エチレンの分子軌道計算 ・エチレンの SAC-CI (色々な基底関数で計算比較)	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 中辻・福田・宮原・中嶋 ・分子軌道の計算 ・励起状態の SAC-CI 計算 ・Q-Band の吸収強度の違い ・構造緩和とエネルギー移動 ・色素設計 フタロシアニン	懇親会 中辻 江原 長谷川
--	--	------------------------------------	---	--	--	---------------------

2日目(6月11日)

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

(advanced コース入門講演) 光材料設計の計算科学 江原 金属化合物の計算科学 江原・福田 ・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と SAC-CI 法 ・金属表面の DAM と触媒作用	光材料設計の計算化学 江原・福田 ・有機 EL 化合物の設計 ・UV ブロッキング色素設計 内殻励起・イオン化のスペクトル 江原・福田 ・内核電子の SAC-CI ・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・中嶋 ・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・中嶋 ・オワンクラゲ由来 GFP の緑色蛍光と DsRed の赤色蛍光 ・計算演習 CD・UV スペクトルと DNA 宮原・中嶋 ・CD (円二色性)スペクトル ・UV (吸収) スペクトルとの比較 終わりに 中辻
--	---	---	---