

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<sub>2</sub>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

金属化合物の計算化学

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

- ・内殻電子の 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