

# 「SAC-CI・1日講習会」

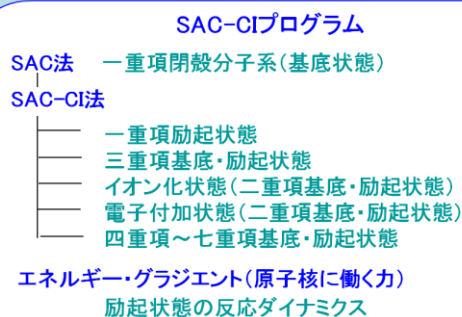
日時 2017年 6月25日(日)  
場所 キャンパスプラザ京都  
5階、第4演習室 (JR京都駅北口をJR沿い西へ徒歩5分位)  
<http://www.consortium.or.jp/about-cp-kyoto/access>

主催 量子化学研究協会研究所 (QCRI)  
講師 宮原友夫 中嶋浩之 黒川悠索 中辻 博  
参加費 講習会運営に係る実費(数千円程度)  
持参物 ノートパソコン(計算の入出力ファイル、講義のPDF等の閲覧に使用)

## SAC-CI on GAUSSIAN

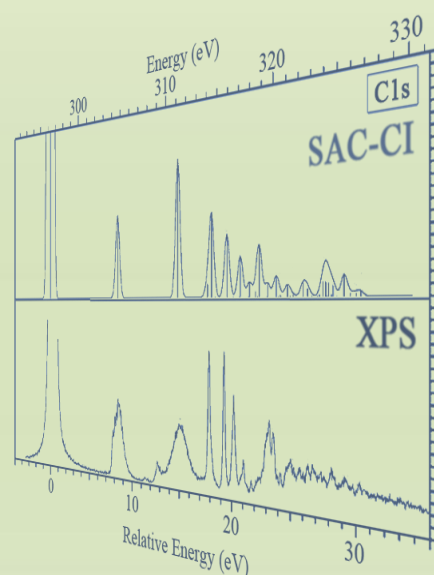
基底・励起状態の電子状態・スペクトル・化学反応の研究のためのプログラム

SAC-CI理論: 分子の全ての電子状態を記述できる電子相関理論 (中辻、1978)



対象: これらの状態が関与する化学と物理

2003年春より Gaussian プログラムに公開



## スケジュール

10:00 11:20 11:40 12:30 13:30 17:00

### SAC-CIが得意なこと、

#### SAC-CIで何が出来る？

- ・SAC-CI理論の紹介
- ・分子の様々な励起・イオン化・アニオン化状態が一度に求まる。
- ・円二色性(CD)スペクトル

#### TD-DFTとSAC-CIの精度

- ・TD-DFTは速い。しかし、その精度で何が言えるのだろうか？それで満足ですか？
- ・励起エネルギー、吸収強度、円二色性(CD)スペクトルの比較

### SAC-CIによる研究例・

#### トピックの紹介

- ・実験精度をも超える精密理論スペクトル
- ・光合成反応中心
- ・視覚蛋白ロドプシン
  - \*ヒトの視覚の機作の解明

### SAC-CIの計算ノウハウを伝授(演習)

- ・GaussianにおけるSAC-CIキーワード
- ・入力の作り方
  - \* 計算条件の選定
  - \* 入力の作り方のノウハウ
- ・出力の見方
  - \* 出力の何を見ればよい？
  - \* Gauss Viewの利用
- ・有機化合物
- ・金属錯体
- ・大きな分子の計算

## 申し込み方法

office @ qcri.or.jp 宛に、芳名、自宅住所、連絡先メールアドレス、所属、をご連絡ください。