

情報化学入門講座(第6回)

Gaussian03 を用いた量子化学計算の初歩とその利用法

主催：社団法人日本化学会 情報化学部会

共催：CAC フォーラム

会期：2007年9月21日(金)

会場：日本化学会館5階(東京都千代田区神田駿河台1-5)

参加申込締切：2007年8月24日(金)

※ただし定員(30名)になり次第締切

[企画趣旨] 講師：堀 憲次(山口大学工学部教授)

本講習会では、主にベンチケミストがパソコンを用いて「計算化学実験」を行うために必要な知識と操作法について解説します。初心者を対象とした分かりやすい内容になっています。

講義内容

1) 計算化学実験に必要な知識

- ・ WinMOSTAR を用いた Gaussian03 の入力 の作成
- ・ 計算結果から必要な情報を得る方法について
- ・ 計算エラーとその対処法
- ・ 基底関数について

2) 計算化学実験に必要な機器

プログラム(2007年9月21日(金))

10:00 受付開始

10:30~12:00 講義 Gaussian03 プログラムを教育・研究に利用するための初歩

13:00~16:00 実習 Gaussian03 プログラムの入力 の作成・計算、計算結果の見方

なお、インターネットを介して実習を行います。次のようなノートパソコンをご持参ください。

- ・ Windows XP もしくは Windows 2000 (Windows Vista は動作確認できていません)
- ・ 無線 LAN (IEEE 802.11g もしくは IEEE 802.11b)
- ・ JAVA をインストールできるもの
- ・ ディスク空容量 20MB、メモリ 256MB 以上

■ 参加費：

主催・共催学会会員（10,000 円）、日本化学会会員（12,000 円）、
非会員（15,000 円）、学生（2,000 円） いずれもテキスト代含む。

■ お支払い方法：次のいずれかからお選びいただけます。

- ・ 当日支払
- ・ 郵便振替（00170-0-6058）
- ・ 銀行振込（みずほ銀行神田小川町支店 普通 1073505 名義：社団法人日本化学会）

■ 参加申込方法：

情報化学部会のホームページの専用申し込みフォームからお申し込みください。

<http://cicsj.csi.jp/>（7月2日にリンクを設置し受付開始いたします）

■ お問い合わせ先：

101-8307 東京都千代田区神田駿河台 1-5 （社）日本化学会情報化学部会
電話：03-3292-6163 F A X：03-3292-6318 E-mail: cicsj@chemistry.or.jp

以上