

情報化学入門講座(第8回)

Gaussian03 と遷移状態データベース (TSDB) を用いた化学反応解析

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

協賛：(株)Transition State Technology

会期：2009年10月28日(水) 10時～17時

会場：山口大学常盤キャンパス D 講義等 D23 番教室

(http://www.yamaguchi-u.ac.jp/annai/access/map_tokiwa/index.html、⑫の建物)

参加申込締切：2009年10月26日(月) ※ただし定員(30名)になり次第締切

■講座内容

講師：堀 憲次(山口大学理工学研究科教授)

実習内容：本講習会では、Gaussian03 プログラムと山口大学で作成している遷移状態データベース (TSDB) を用いた化学反応の解析について解説と実習を行います。

1. 計算化学を用いた反応解析のために必要な知識

1. WinMOSTAR を用いた Gaussian03 の入力作成
2. 計算結果の見方
3. 計算エラーとその対処法

2. TSDB を用いた反応解析

1. TSDB を用いたデータ検索
2. TSDB を用いた遷移状態探索法

3. プログラム

10:00 受付開始

10:30～12:00 講義 Gaussian03 プログラムと TSDB を反応解析に利用する方法について解説する。

13:00～17:00 実習 Gaussian03 プログラムの入力作成・計算および TSDB を用いた反応の解析

4. パソコン

Gaussian03 プログラムを用いた実習に必要なプログラムをインストールしても問題のないノートパソコンをご持参ください。

(1) Windows XP もしくは Windows 2000 (Windows Vista は動作確認できていません)

(2) 無線 LAN (IEEE 802.11g もしくは IEEE 802.11b) もしくは LAN 接続の端子を持

つもの

- (3) JAVA をインストールします。
- (4) ディスク空容量 20MB、メモリ 256MB 以上

■参加費（予定）

主催・共催学会会員（10,000 円）、日化・協賛学会会員（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。
情報化学討論会に参加する方には講習会費を 2,000 円（学生 1,000 円）割り引きます。

■お支払い方法

次のいずれかからお選びいただけます。

1. 当日支払い
2. 郵便振替（00170-0-6058）

または銀行振込（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（予定）

以下の、日本化学会情報化学部会宛に電子メールにてお申し込み下さい。

cicsj@chemistry.or.jp

メールには、参加者の所属、氏名、連絡先（住所、e-mail アドレス）、支払い方法を明記してください。

■お問合せ先（予定）

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 FAX：03-3292-6318 E-mail: cicsj@chemistry.or.jp

または

山口大学大学院理工学研究科物質工学系専攻 堀憲次

電話 0836-85-9238 FAX 0836-85-9601 E-mail: kenji@yamaguchi-u.ac.jp