

NaBiT物質科学系大学院集中講義 「計算化学演習」

日時：平成21年1月7日（水）～1月9日（金）
（1時限～10時限）

場所：理学部 D207 室

演習内容

- 1月7日（水） **Linux**および分子グラフィックスソフトの基本的な使い方と
 Gaussian03の入力データの作成および練習計算
- 1月8日（木） 分子の平衡構造および遷移状態構造の最適化と反応座標の計算
- 1月9日（金） 反応設計のための応用計算

世界で最も標準的に用いられている非経験的分子軌道計算プログラム**Gaussian03**を用いて、計算化学の演習を行います。無機化学・有機化学・生物化学分野において、実際の研究に役立つ分子構造の最適化や反応座標の量子化学計算の方法を演習します。

担当 松原 世明 広島大学大学院理学研究科
 広島大学量子生命科学プロジェクト研究センター

講義コード：（Q3041002）

もみじ履修登録期間：平成20年12月26日（金）まで

連絡先 松原 世明 (matsu05@hiroshima-u.ac.jp)
 相田 美砂子 (maida@hiroshima-u.ac.jp: 内線7412)

<注意事項>

「計算情報化学」受講者はその授業資料および課題資料を持参して下さい。