

2020.05.25 (Mon) 開催

特定非営利活動法人
量子化学探索研究所
Institute for Quantum Chemical Exploration



GRRM チュートリアル 2020

◆ 開催概要 ◆

日時：5月25日(月) 10:00 - 15:00

(受付開始：9:30)

主催：NPO法人量子化学探索研究所 (IQCE)

場所：東京駅八重洲北口「貸し会議室プラザ八重洲北口」
(東京都中央区 八重洲 1-7-4 矢満登ビル 5F1号室)
(Web接続電子講習を並行して開催)

司会・講師：大野公一 IQCE 理事長、東北大学名誉教授

講師：渡邊啓正 IQCE 客員研究員
時子山宏明 IQCE客員研究員

GRRM講習会「GRRMチュートリアル2020」を開催します。

新方式：remote **オンライン電子講習**の受講もできます！

● GRRM講習

- ・GRRM-Basic, GRRM-Neo11, GRRM14の紹介
- ・GRRMの応用例 (会場受講者は、無線LAN・WiFiが使えるPCを各自ご用意ください)
- ・GRRM-Trial-Jobの実習 (各自のPCから計算サーバにSSH接続)

● テキスト資料・参考書

・講習用参考文献

GRRMの文献：S. Maeda, et al., Phys.Chem.Chem.Phys. 2013, 15, 3683

・参考資料 (科学雑誌記事)

「分子の反応経路の自動探索が可能になった」前田理・大野公一・諸熊奎治、現代化学、478(1),32 (2011).

・「反応経路自動探索」前田理、化学、68(3), 12 (2013).

● 受講対象

- ・コンピュータを用いて未知の化学を探索してみたい方。
- ・GRRMプログラムの初歩的使い方を知りたい方。
- ・GRRM-Beginner向けversionに興味のある方。

● 受講によって修得できる知識

- ・未知の化学反応や化学構造を最先端理論で探索する
GRRMプログラム利用法の基礎が修得されます。

● 募集定員：35名 (先着順とさせていただきます)

- ・会議室参加者：20名以内 (定員40名の会議室の隣接しない20名分の座席を利用)
- ・オンライン電子講習参加者：会議室参加者と合計して35名まで

● 参加費

一般：(IQCE会員) 5千円、(非会員) 1万円
学術機関：(IQCE会員) 3千円、(非会員) 5千円
学生：(IQCE会員) 2千円、(非会員) 3千円

※ただし、IQCE団体賛助会員は、年会費の口数まで、会員扱いいたします。

● 受講に当たって必要なこと

- ・量子化学計算の初歩的な知識と経験
- ・Linuxの使い方 (Linux計算機へのSSH接続とテキストファイルの閲覧・編集)
- ・会議室参加者：会場のWiFiで受講者のPCからWeb接続できること
- ・オンライン電子講習参加者：静かな環境で受講者のPCからWeb接続できること

● 参加費振込先

三菱UFJ銀行 田町支店(店番043) 普通0532024
口座名：(トクヒ) リョウシカガクタンサクケンキュウシヨ
(「トクヒ」は、「特定非営利活動法人」の略号です。)

領収書は、当日お渡しいたします。振込票は、大切に保管ください。

領収書の宛名として「参加申込者以外」の必要のある場合は、参加申込時に
その旨、ご連絡ください。

振込期限：2020年5月22日(金)

● 参加申込

参加申込締切：2020年5月15日(金)

申込方法：「氏名・所属・身分・連絡先・会議室参加希望有無」を明記して、電子メールで下記宛てにお申込みください。

mail@iqce.jp

IQCE Web: <https://iqce.jp/>