

2021.07.08 (Thu) 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 2021

◆ 開催概要 ◆

日時：7月8日(木) 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：電子講習オンライン (Zoom)

司会：大野公一 IQCE 理事長、東北大学名誉教授

講師：前田理 IQCE 会員、北海道大学教授

原渕祐 IQCE 会員、北海道大学助教

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2021」を開催します。

● GRRM講習

・GRRMプログラム (最新版GRRM20) の紹介

受講者各自のPCから計算サーバーにSSH接続して実習を行います。

● テキスト資料・参考書

・講習用参考文献

S. Maeda, et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 2013, 15, 3683.

S. Maeda, et al., J. Comput. Chem. 2018, 39, 233.

・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).

● 募集定員：30 名

(先着順となります。お早目にお申し込みください。)

● 参加費

一般：(IQCE会員) 1万円、(非会員) 2万円

学術機関：(IQCE会員) 5千円、(非会員) 1万円

学生：(IQCE会員) 3千円、(非会員) 5千円

※ただし、IQCE団体賛助会員は、年会費の口数まで、会員扱いといたします。

● 参加費振込先

三菱UFJ銀行 田町支店(店番043) 普通0532024

口座名：(トクビ) リョウシカガクタンサクケンキュウジヨ

(「トクビ」は、「特定非営利活動法人」の略号です。)

振込票は、大切に保管ください。領収書が必要な方は、領収書送付先をご連絡ください。

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、その旨、ご連絡ください。

振込期限：2021年7月2日(金) 15:00 (厳守願います。)

● 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プログラムの使い方を知りたい方。

● 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。

● 受講注意事項：

・オンライン接続・参加受講者本人のみ。

・録音・録画禁止。

・質問時間以外受講者の映像・音声停止。

● 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計算機へのリモート接続とテキストファイルの閲覧・編集)

・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。

● 参加申込

参加申込締切：2021年6月25日(金)

申込方法：「氏名・所属・身分・連絡先・ご使用PC種別」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/>