

2022.10.19(Wed) 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

2022

◆ 開催概要 ◆

日時：10月19日(水) 10:00-16:30
(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
原遡祐 IQCE 会員、北海道大学助教

GRRM講習会「GRRMチュートリアル2022」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., WIREs Comput. Mol. Sci. 2021, 11, e1538.

・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、会員扱いいたします。

● 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ジョ
(「トクヒ」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：2022年10月14日(金) 15:00 (厳守願います。)

● 参加申込

参加申込締切：2022年10月1日(土)

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し込みください。

mail@iqce.jp

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