

2023.11.24(Fri) 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

2023

◆ 開催概要 ◆

日時：11月24日(金) 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：秋葉原UDXビル 6階 Dルーム

司会：河野裕彦 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

原淵 祐 IQCE 会員、北海道大学特任准教授

GRRM講習会「GRRMチュートリアル2023」を開催します。

● GRRM講習

- ・GRRMプログラム(最新版GRRM23)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, Y. Harabuchi, *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2021**, *11*, e1538.

● 参考資料 (科学雑誌記事)

「反応経路自動探索」前田理、*化学*, 68(3), 12 (2013).

「量子化学計算に基づく反応予測」

前田理、*有機化学イノベーション*, 山本尚監, 東京化学同人, **2023**.

● 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。

● 会場へのアクセス

東京都千代田区外神田4-14-1 秋葉原UDX南ウイング6F

JR秋葉原駅電気街口から徒歩すぐ。

● 参加費振込先

三菱UFJ銀行 田町支店(店番043) 普通0532024

口座名：トク七 リョウシカガクタンサクケンキュウジヨ

(「トク七」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：2023年11月10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を修得できます。

● 受講注意事項：

- ・録音・録画禁止。
- ・ワイヤレスネットワーク接続可能なノートPCを各自持参のこと。

● 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)

● 参加申込

参加申込締切：2023年11月3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し込みください。

office_iqce@iqce.jp

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