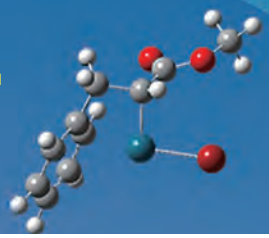
反応経路・遷移状態 計算ソフトウェア

Reaction plus Pro 2

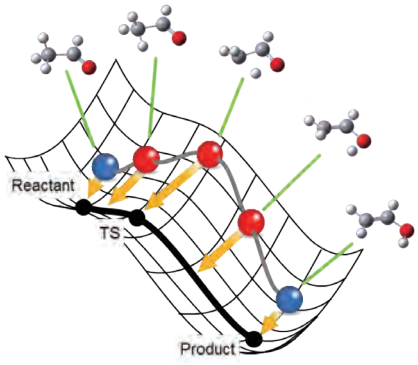
Reaction plus Express 2

簡単・手軽に反応メカニズムがわかる!!



基底状態の反応はもちろん、励起状態にも適応可能です

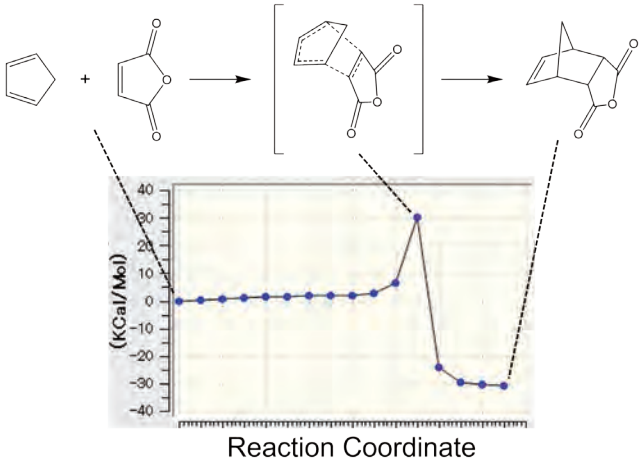
Reaction plus Pro2 の特徴



- 反応経路や遷移状態が簡単・手軽に見つかる
- 反応の様子が動画でわかる
- 計算エンジンにGaussianを採用することにより高速化を実現

Reaction plus Pro2 の計算例

Diels-Alder反応



有機化学のための量子化学計算入門

Gaussianの基本と有効利用のヒント

東京都立大学准教授　博士(工学)　西長　亨
HPCシステムズ株式会社 計算化学シニアエキスパート　博士(工学)　本田　康
(共著)

1. 量子化学計算で何ができるか？
2. 計算実行のための環境づくり
3. 計算手法と基底関数
4. Gaussianの基本的な使い方
5. 構造最適化
6. 分子軌道
7. 基底状態の物性
8. 化学反応メカニズム
9. 開殻系の取り扱い
10. 励起状態の物性
11. 計算を有効活用するためのヒント

株式会社裳華房／B 5 判／224 頁／2 色刷／2022 年 6 月発行／ISBN 978-4-7853-3523-6　C3043

定価 3,850 円（本体 3,500 円＋税 10 %、送料込み）

インターンシップ

HPCシステムズでは、インターンの受け入れを実施しています。
詳しくは、QRコードか、もしくはメールアドレスからお問い合わせください。

採用担当まで
hpcs_hr@hpc.co.jp

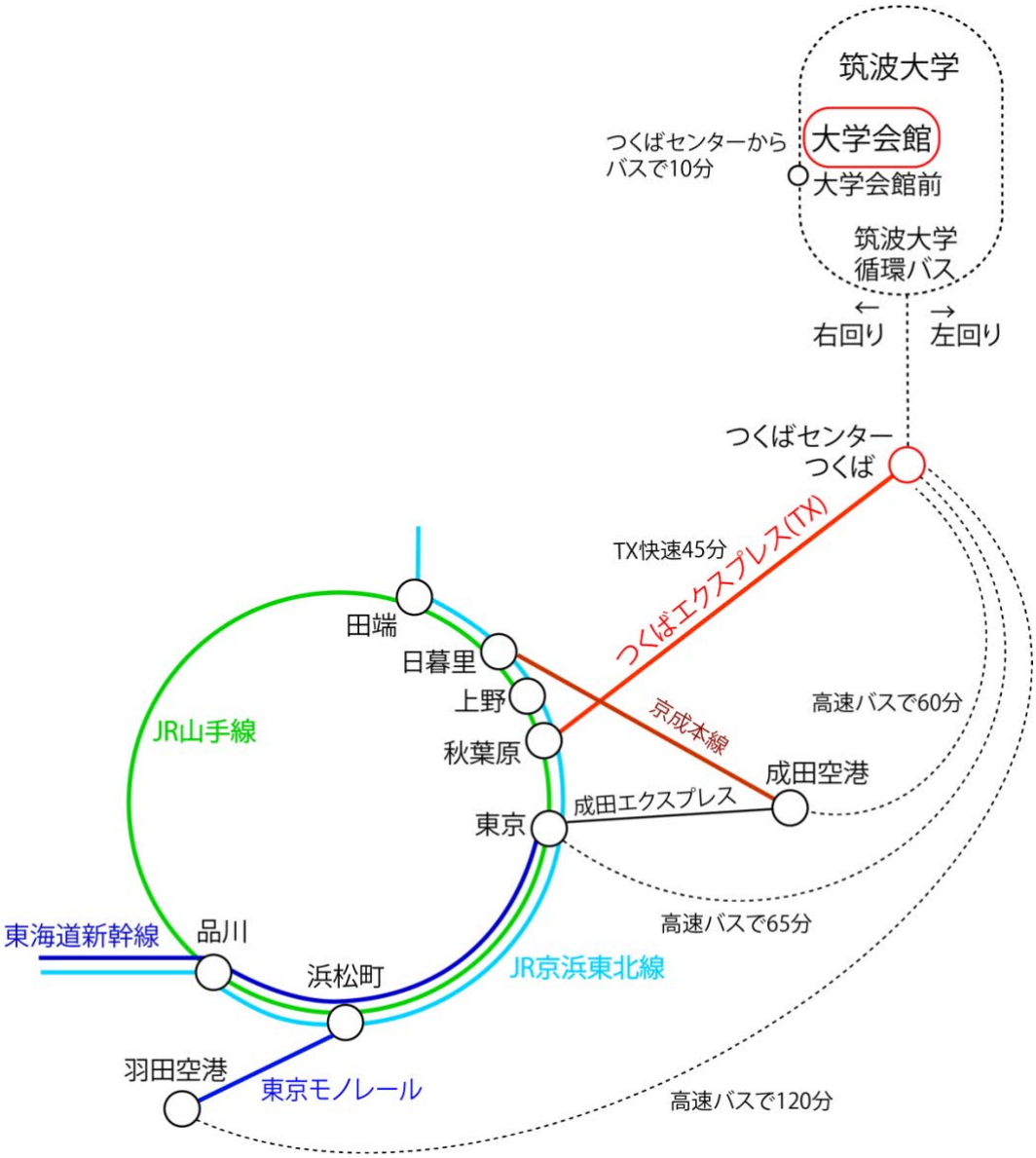
HPC SYSTEMS

HPCシステムズ株式会社
本　　社（東京）：03-5446-5531
西日本営業所（京都）：075-353-0120

www.hpc.co.jp
hpcs_sales@hpc.co.jp

※ 会社名及び製品名は、当社及び各社の商標または登録商標です。※ 価格、写真、仕様等は予告なく変更する場合があります。※ 製品の色調は実際と異なる場合があります。※ 2022年7月現在の内容です。

会場までのアクセス



討論会会場:

筑波大学大学会館 （茨城県つくば市天王台 1−1−1　筑波キャンパス南地区）

最寄りバス停は「大学会館前」です。

交通案内: 1.の方法をお勧めします。

1.　　つくばエクスプレス（TX）＋筑波大学行きバス

つくばエクスプレスで秋葉原駅より快速 45 分、終点「つくば駅」で下車。A3 出口より地上に出て、6番バス停にて、関東鉄道バス“筑波大学循環バス右回り”または“筑波大学中央”に乗車、「大学会館前」で下車。バスは約 20 分間隔で運行しています。料金は TX が 1,210 円、バスが 230 円（IC カード利用可）。

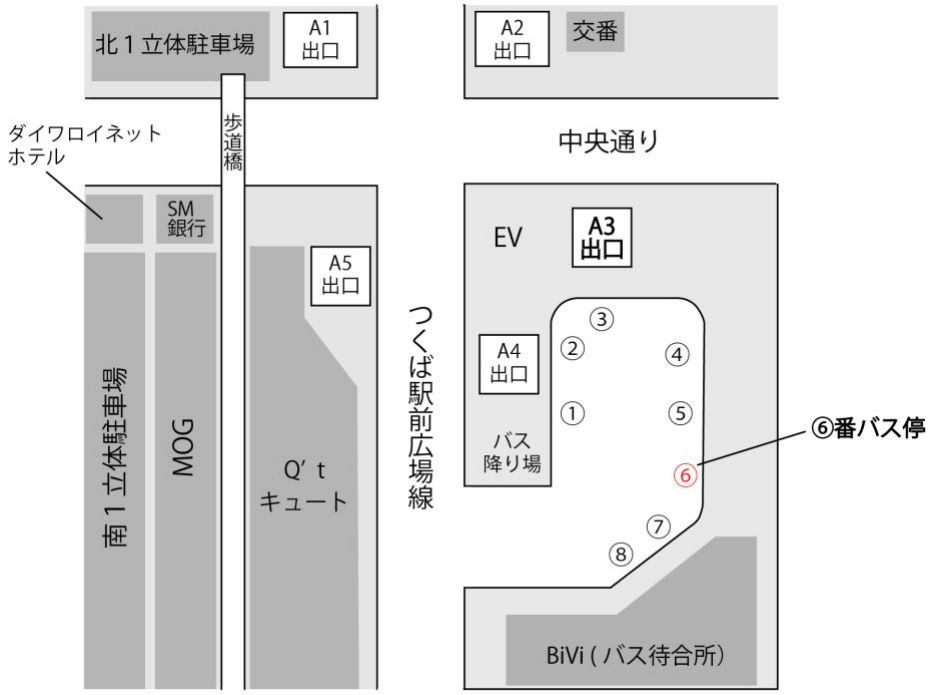
2.　高速バス

羽田空港、成田空港から高速バスにて「つくばセンター」に行けます。東京駅八重洲南口から出発する高速バスつくば号（筑波大学行き）を利用すると「大学会館前」まで直接行けます（30 分間隔で運行、所要時間約 75 分、料金は 1,260 円）。

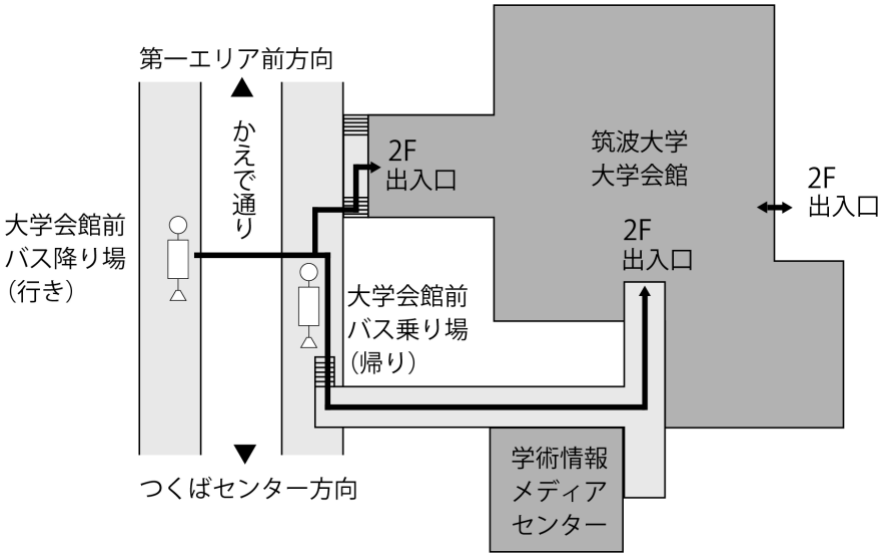
3.　自家用車

大学内の駐車場は限られますので、公共交通機関をご利用ください。どうしても駐車場利用が必要な方は実行委員会までご相談ください。

TX つくば駅・つくばセンター地図



大学会館前バス停地図



バスの時刻表

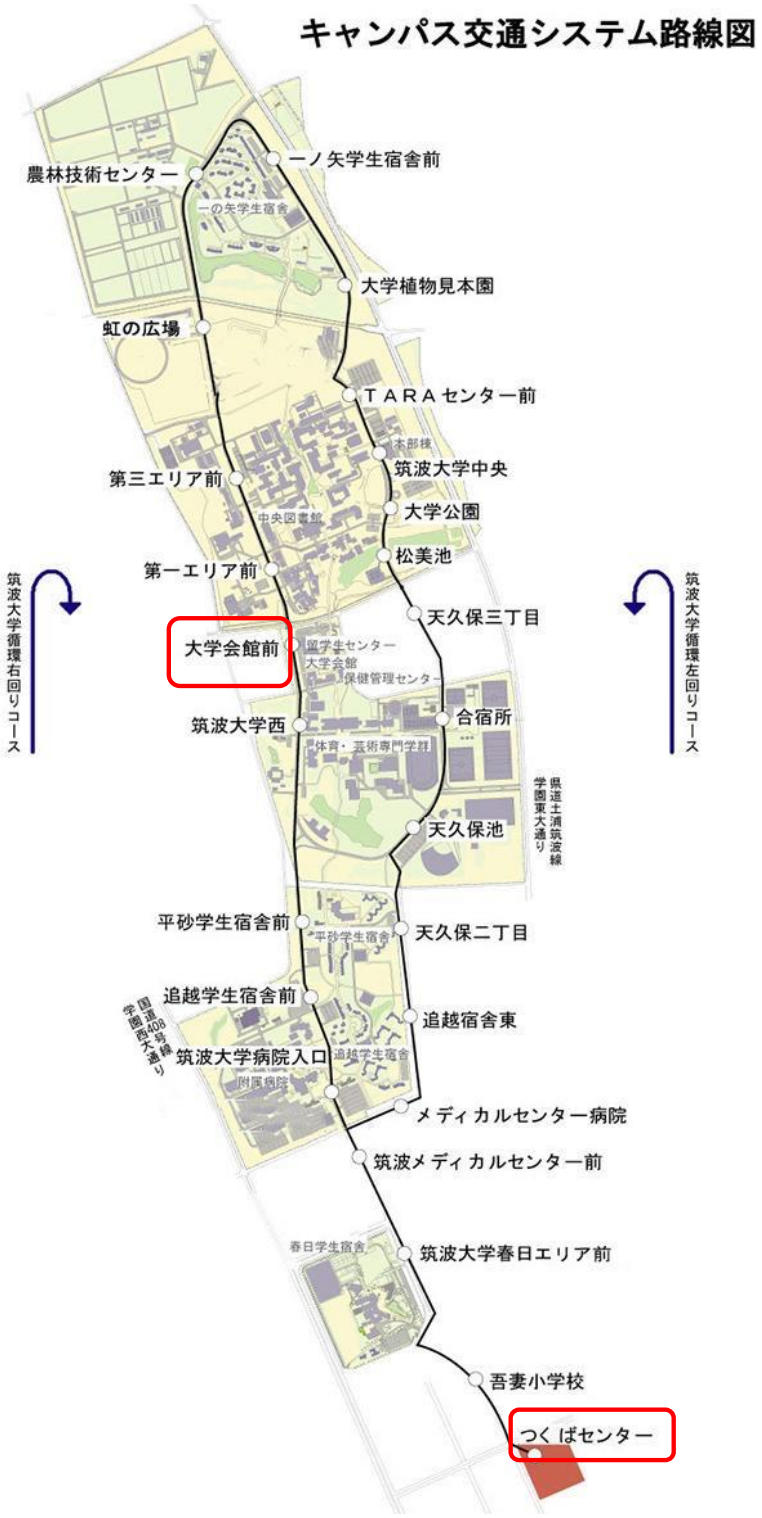
つくばセンターから大学会館前までの大学循環バスの所要時間は約13分です。

往路: つくばセンター発

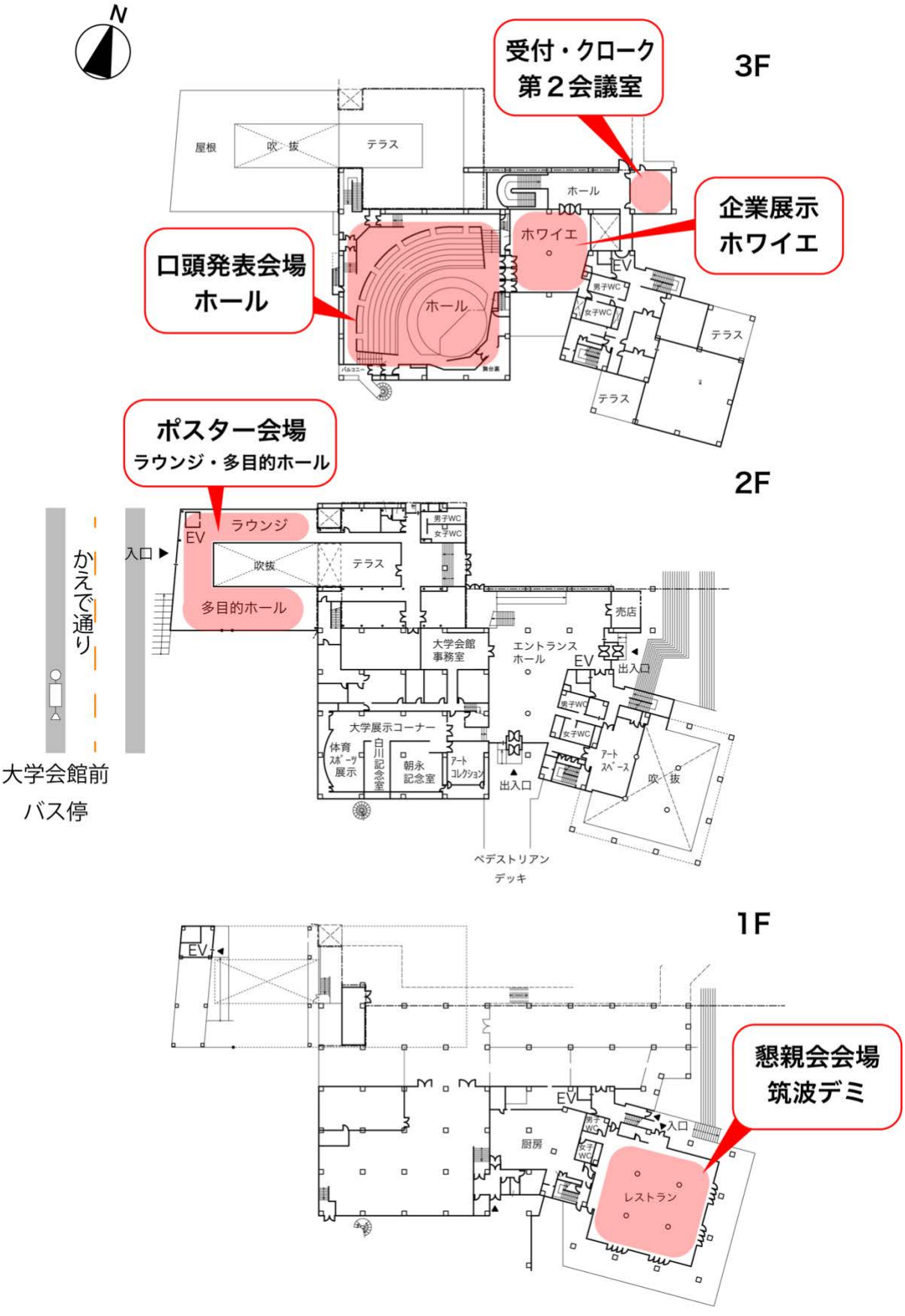
種別 時	筑波大学循環右回り、平日 分
6	00(始発)　40
7	20　50
8	00　10　30　40　50
9	10　20　30　50
10	00　20　40
11	00　20　40
12	00　20　40
13	00　20　40
14	00　20　40
15	00　20　40
16	00　20　40
17	00　20　40
18	00　20　40
19	00　20　40
20	00　20　40
21	00　40
22	20(最終)

復路: 大学会館前発

種別 時	筑波大学循環左回り、平日 分
6	40(始発)
7	21
8	01　41
9	21
10	01　31　51
11	11　31　51
12	11　31　51
13	11　31　51
14	11　31　51
15	11　31　51
16	11　31　51
17	11　31　51
18	11　31　51
19	11　31　51
20	11　30　50
21	10　40
22	20(最終)



大学会館内案内図


N
受付・クローク
第２会議室
3F
屋根
吹抜
テラス
ホール
ホワイエ
企業展示
ホワイエ
口頭発表会場
ホール
ホール
EV
男子WC
女子WC
テラス
テラス
ポスター会場
ラウンジ・多目的ホール
2F
かえで通り
入口
EV
ラウンジ
吹抜
テラス
多目的ホール
男子WC
女子WC
売店
大学会館
事務室
エントランス
ホール
EV
出入口
大学展示コーナー
体育
ｽﾎﾟｰﾂ
展示
白川
記念室
朝永
記念室
ｱｰﾄ
ｺﾚｸｼｮﾝ
出入口
ｱｰﾄ
ｽﾍﾟｰｽ
吹抜
大学会館前
バス停
ペデストリアン
デッキ
1F
EV
EV
厨房
男子WC
女子WC
入口
懇親会会場
筑波デミ
レストラン

大学会館近隣店舗マップ

施設名称（方位と距離，片道にかかる時間，エリア）

学食

- ❶ 筑波デミ（大学会館，0km, 3B）
- ❷ 第１エリア食堂（北に 500m, 徒歩７分，2B）
- ❸ 第２エリア大食堂　（北に 1km, 徒歩 12 分，1B）
- ❹ からめんや（第２エリア，北に 1km, 徒歩 12 分，1B）

軽食

- ❺ 購買部（大学会館，徒歩１分，3B）
- ❻ パン販売（体芸５C 棟、南に 300m, 徒歩５分，4B）
- ❼ 粉とクリーム（体芸 エリア、南に 400m, 徒歩６分，4B）
- ❽ パン（１D 棟，北に 500m, 徒歩７分，2B）

喫茶

- ❾ スープファクトリー（第一エリア，北に 500m, 徒歩７分，2B）
- ❿ スターバックス（中央図書館，北に 800m, 徒歩 10 分，1B）

書籍部

- ⓫ 大学会館書籍部（丸善，徒歩１分，3B）

コンビニエンスストア

- ⓬ セブインイレブン　（東に 500m, 徒歩７分，2C）
- ⓭ ミニストップ（西に 500m, 徒歩７分，3A）
- ⓮ ローソン（東に 700m, 徒歩 10 分，3D）

郵便局

- ⓯ 筑波大学内郵便局（大学会館，徒歩１分，3B）

病院

- ⓰ 保健管理センター（南に 50m, 徒歩２分，3B）

見学コース

- ⓱ 筑波大学ギャラリー（大学会館，3B）
- ⓲ 筑波大学周回コース（５km（ゆりのき通り、かえで通り、、、））
- ⓳ 筑波実験植物園（東に 1.1km, 徒歩 15 分，4E）