

## 第4回 量子化学ウィンタースクール

### 第4回量子化学ウィンタースクール～大規模系を目指した基礎理論～ TCCI ウィンターカレッジ：量子化学

?

現在、電子状態理論は大規模系や複雑系への適用が可能になっています。その背景には、大規模系を目指した理論開発や高並行計算技術の進歩があります。このセミナーでは、基礎から最新の理論と計算技術について解説します。電子状態理論を志している学部学生や大学院学生、若手研究者、また実験研究者の方々など、電子状態理論に興味を持つ方々が対象です。

司会者	江原正博（分子研・計算センター）
	柳井 肇（分子研）
	中嶋隆人（計算科学研究機構）
	天能精一郎（神戸大学）

主 催：自然科学研究機構 分子科学研究所

共 催：計算分子科学研究拠点（TCCI）

計算物質科学イニシアティブ（CMSI）

理化学研究所 計算科学研究機構

自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター

会 場：岡崎コンファレンスセンター2階

小会議室 <http://www.orion.ac.jp/occ>

ポスター会場：小会議室前

会 期：2014年12月15日（月）、16日（火）

参加費：無料

懇親会：2014年12月15日（月）18:00～

分子科学研究所 職員会館2F

懇親会費（一般）3,000円、（学生）2,000円

■参加申込み方法：web受付

\*申込を締め切りました。多数のご応募ありがとうございました。

### ■宿泊について（三島ロッジ）

\*ロッジは部屋に限りがあり、先着順とします。

\*ホテル宿泊の方は、各自でホテルの宿泊の手配をしてください。

下記URLをご参考ください。

<http://www.ims.ac.jp/location/hotel.html>

### ■旅費・宿泊費のサポートについて

\*学生限定(予算に限りがありますので、ご希望に添えない場合もあります)

学生の方は、賠償付障害保険の加入が参加の条件です。

\*往復交通費(自然科学研究機構規定額)及び宿泊費の一部(2500円/泊)を支給します。

【注】手続き書類は、早急にご対応お願い致します。手続き依頼後、1ヶ月以上未提出の場合は、旅費支給できかねる場合があります。

### ■量子化学ウィンタースクールおよびホームページに関する問い合わせ先

自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター

量子化学ウィンタースクール担当

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地

TEL:0564-55-7273

FAX:0564-55-7025

E-mail: [kawaguti\\_at\\_ims.ac.jp](mailto:kawaguti_at_ims.ac.jp)

※メールアドレス内の「\_at\_」は「@」に直してお送り下さい。

\*このページ内の著作権はすべて分子科学研究所に属します。

無断転載等は一切お断りいたします。

### 開催プログラム

12月15日（月）

13:30 - 13:40	はじめに
司会：大西裕也（神戸大学）	
13:40 - 15:30	森 寛敏先生（お茶の水大学） 「分子軌道法の基礎と相対論的有効ポテンシャル法」
15:30 - 15:40	休憩
15:40 - 17:30	中井浩巳先生（早稲田大学） 「量子化学における第2量子化の手法」
18:00 - 19:30	懇親会

12月16日（火）

司会：今村 穢（計算科学研究機構）

	Stephan Irle先生（名古屋大学）
9:00 - 10:50	「Density-Functional Tight-Binding Method for Complex Systems in Ground and Excited States」
10:50 - 11:00	休憩
11:00 - 12:00	受講者の研究発表（poster）
12:00 - 13:30	昼食

司会：大塚勇起（神戸大学）

	青木百合子先生（九州大学） 「Elongation法の原理と機能設計への展開」
13:30 - 15:20	休憩
15:20 - 15:30	波田雅彦先生（首都大学東京） 「分子の磁気的性質」
15:30 - 17:20	おわりに
17:20 - 17:30	