

## 第6回 量子化学スクール

### 第6回量子化学スクール～基礎理論と複雑分子系の理論～

ポスト「京」重点課題5：量子化学 計算物質科学人材育成コンソーシアム 量子化学スクール

「量子化学スクール～基礎理論と複雑分子系の理論～」を下記の要領で開催致します。近年、電子状態理論は大規模系や複雑分子系への適用が可能となってきました。そこで今回のスクールでは、電子状態理論の基礎から大規模系・複雑分子系への展開まで幅広く学んで頂ける講習会を企画しました。講義は、最先端の研究を行っておられる講師陣が担当し、電子状態理論の基礎から分かりやすく解説して頂きます。また、講師陣との意見交換や交流もできるように、参加者によるポスター発表も企画しました。積極的な参加を期待しています。電子状態理論をはじめようとしている学部学生や大学院学生、若手研究者、実験研究者の方々など、電子状態理論に興味を持っておられる皆様のご参加をお待ちしております。

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っておられる幅広い分野からのご参加をお待ちしております。

#### 世話人

藤田貴敏（分子研）

江原正博（分子研・計算セ）

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  
ポスト「京」重点課題5  
計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）

共催：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：2016年12月19日（月）、20日（火）  
参加費：無料

【注意】資料集の郵送は致しておりません。  
参加された方のみ配布いたします。

懇親会：2016年12月19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

\*申し込みを締め切りました。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。

<http://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.hotel.html>

【重要】ロッジ以外の宿泊の方

領収書、宿泊証明書等、宿泊を証明する物のご提出お願いいたします。

#### ■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

【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か月以上未提出の場合は、旅費支給いたしかねます。

#### ■量子化学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19日 (月)

|               |  |
|---------------|--|
| 13:30 - 13:40 | はじめに   |
| 司会：藤田貴敏(分子研)  |  |
| 13:40 - 15:30 | 森 寛敏先生 (お茶の水女子大学)<br>「手軽かつ精密な量子化学計算を可能にするモデルポテンシャル法」 |
| 15:30 - 15:40 | 休憩   |
| 15:40 - 17:30 | 阿部襄里先生 (首都大学東京)<br>「相対論量子化学の基礎から応用」                  |
| 18:00 - 19:30 | 懇親会  |

### 12月20日 (火)

|                   |                                     |
|-------------------|-------------------------------------|
| 司会：澤田啓介(計算科学研究機構) |                                     |
| 9:00 - 10:50      | 小林正人先生 (北海道大学)<br>「大規模量子化学計算の基礎」    |
| 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：大西裕也 (神戸大)     |                                     |
| 13:30 - 15:20     | 今田正俊先生 (東京大学)<br>「強相関電子系のための数値手法」   |
| 15:20 - 15:30     | 休憩                                  |
| 15:30 - 17:20     | 横川大輔先生 (名古屋大学)<br>「電子状態理論と溶媒和理論の融合」 |
| 17:20 - 17:30     | おわりに                                |