

第11回 量子化学スクール

第11回量子化学スクール

2021年度も11月30日、

12月1日の日程で「第11回量子化学スクール」を開催いたします。今年度は新型コロナウイルス感染拡大の影響を鑑み、オンラインで
これから量子化学を始めようとしておられる学部生や大学院生、量子化学プログラムを使用してみたい実験研究者や企業研究者

世話人 藤田貴敏（量子科学技術研究開発機構）
清野淳司（早稲田大学）
中井浩巳（早稲田大学）
江原正博（分子研、計算セ）

主 催：自然科学研究機構 分子科学研究所
計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）
理論化学会

共 催：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

開 催 方 法：Zoomによるオンライン開催

開 催 日：2021年11月30日(火)～2021年12月1日(水)

参 加 費：無料

申 込 締 切：2021年11月22日(月)

定 員：500名

■ 参加申込方法: web受付

参加ご希望の方は、**11月22日(月)まで**に下記のサイトから申し込みください。

????????????????????

<https://registration.ims.ac.jp/qcs2021/registration>

ご登録時に登録確認メールを自動送信します。メールが届かない場合は、下記問い合わせ先へご連絡ください。

後日スクール参加のための必要情報 (Zoom ID、PW,
テキスト情報等) がメールにて配信されます。

※11月26日にZoomのURLと講義資料のDL先に関するメールを参加者に送信いたしました。
メールが届いていない方はスクール事務局(qcs-school@ims.ac.jp)へメールでご連絡下さい。
(?????????gmail?????????????????)

■ 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 計算科学研究センター

量子化学スクール事務局

〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地

TEL:0564-55-7462

E-mail: qcs-school_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

11月30日(火)

司会：藤田貴敏	
9:00 - 9:10	開会の挨拶 中井浩巳（早稲田大学）
9:10 - 10:40	小林 正人 先生（北海道大学） 「Hartree-Fock(-Roothaan)法: 理論概要から詳細、数値結果まで」
10:50 - 12:20	中谷 直輝 先生（東京都立大学） 「電子相関とpost-HF法」
司会：清野淳司	
14:00 - 15:30	神谷 宗明 先生（岐阜大学） 「密度汎関数理論の基礎」
15:40 - 17:10	福田 良一 先生（京都大学） 「電子励起状態の計算化学」
司会：清野淳司	
17:30 - 18:30	交流会

12月1日(水)

司会：藤田貴敏	
9:00 - 10:30	岸 亮平 先生（大阪大学） 「量子化学に基づく分子物性の予測と解釈」
10:40 - 12:10	和佐田 祐子 先生（名古屋工業大学） 「GaussianによるSCFおよび構造最適化計算の実際」
司会：藤田貴敏	

14:00 - 15:30	水上 渉 先生 (大阪大学) 「量子コンピュータを用いた量子化学計算の基礎」
15:40 - 17:10	藤波 美起登 先生 (早稲田大学) 「機械学習の基礎と実践のためのヒント」
17:10 - 17:20	閉会の挨拶 江原正博 (分子研)