

### 第10回量子化学スクール 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

2020年12月1日から2日までの日程で、「第10回量子化学スクール」を開催いたします。スクールは分子科学研究所、計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）、理論化学会の主催として行います。今年度は新型コロナウイルス感染拡大の影響を鑑み、オンライン開催となりました。講義は量子化学を基礎から学んで頂けるような内容になっているため、量子化学の経験や専門知識は前提としません。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、または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など、幅広い分野からのご参加をお待ちしております。

藤田貴敏（分子研）  
中井浩巳（早稲田大学）  
世話人 中嶋隆人（R-CCS）  
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：理化学研究所 計算科学研究センター（R-CCS）  
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によるオンライン配信

開催日：2020年12月1日（火）～ 2020年12月2日（水）

参加費：無料

定員：250名

#### ■ 参加申込方法: web受付

参加ご希望の方は、11月24日（火）

**\*申し込みを締め切りました。多数の登録ありがとうございました。**

後日スクール参加のための必要情報（Zoom ID、PW、講義資料情報等）をメールにて配信いたします

**\*11月27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)にご連絡ください。**

#### ■ 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 分子科学研究所  
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:0564-55-7273  
FAX:0564-55-7025  
E-mail: [qcs-school\\_at\\_ims.ac.jp](mailto: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。

**12月1日 (火)**

|                      |  |
|----------------------|--|
| <b>9:00 - 9:10</b>   | 開会の挨拶  |
| <b>9:10 - 10:40</b>  | 小林正人 先生 (北海道大学)<br>「Hartree-Fock(-Roothaan)法: 理論概要から詳細、数値結果まで」 |
| <b>10:50 - 12:20</b> | 中谷直輝 先生 (東京都立大学)<br>「電子相関とpost-HF法」                            |
| <b>14:00 - 15:30</b> | 神谷宗明 先生 (岐阜大学)<br>「密度汎関数理論の基礎」                                 |
| <b>15:40 - 17:10</b> | 福田良一 先生 (京都大学)<br>「電子励起状態の計算化学」                                |

**12月2日 (水)**

|                      |   |
|----------------------|---|
| <b>9:00 - 10:30</b>  | 岸亮平 先生 (大阪大学)<br>「量子化学に基づく分子物性の予測と解釈」               |
| <b>10:40 - 12:10</b> | 和佐田祐子 先生 (名古屋工業大学)<br>「GaussianによるSCFおよび構造最適化計算の実際」 |
| <b>14:00 - 15:30</b> | 吉田紀生 先生 (九州大学)<br>「溶媒効果」                            |
| <b>15:40 - 17:10</b> | 笠松秀輔 先生 (山形大学)<br>「固体の電子状態計算の基本と応用」                 |
| <b>17:10 - 17:20</b> | 閉会の挨拶   |