

第12回量子化学スクール

2022年12月6 - 8日の日程で「第12回量子化学スクール」を開催いたします。今年度は、参加者と講師の先生方との交流も考慮して、ハイブリッド開催として計画しています。開催時期の状況によっては、オンライン開催となる場合もございます。講義は量子化学を基礎から学んで頂ける内容になっており、量子化学の経験や専門知識は前提としていません。本年度はトピックスとして量子コンピュータやインフォマティクスの内容も含めています。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など、幅広い分野からのご参加をお待ちしております。なお、オンラインで参加いただいた方には、修了証を発行いたします。

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

開催場所：岡崎コンファレンスセンター・ハイブリッド開催  
（オンライン開催になる場合もございます）

開催日：2022年12月6日(火)～2022年12月8日(木)

参加費：無料

定員：100名（現地参加）  
500名（Zoomウェビナー参加）

申込締切：2022年11月7日（月）まで（現地参加）  
2022年11月28日（月）まで（Zoomウェビナー参加）

#### ■ 宿泊について

- \*近郊ホテルのご案内は、下記にございます。ホテル宿泊は、ご自身で予約お願い致します。  
近郊ホテルURL <https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>
- \*共同利用研究者宿泊施設（三島ロッジA・I・N室のみ）1泊2600円をご利用いただけます。希望される方は参加登録のロッジ希望にお申込みください。  
（部屋数に限りがあるため先着順。宿泊が必要な遠方の方を優先としますのでご了承下さい。）
- \*宿泊施設をおとりした方には申込から1週間以内にメールにて連絡いたします。  
ロッジURL <http://www.occ.orion.ac.jp/lodge/>

\*ロッジ宿泊の申込予定数を越えたためロッジの宿泊受付を終了します。申し訳ございません

#### ■ 交通費のサポートについて

- \*学生限定（学部生も可。予算に限りがあり、ご希望に添えない場合もあります。）
- \*往復交通費（自然科学研究機構規定額）を支給します。（宿泊代は支給しませんのでご了承下さい。）
- \*サポート可能な方には、所定の手続き案内メールを差し上げます。案内メールの届かなかった方は、申し訳ありませんがサポート致しかねますのでご了承下さい。
- \*交通費サポート希望の方で、飛行機をご利用される方は、その旨「連絡事項」にご記入下さい。（領収書・航空券明細・搭乗券半券(搭乗証明書)の提出が必要となります。）  
移動距離が短い場合や開催日より離れて搭乗日がある場合は支払の対象外となります。

\*予算に達したため交通費のサポート受付は終了しました。(2022.11.1)

\*サポート可能な方には、所定の手続き案内メールを差し上げます。(2022.11.1を予定)

■ 学生の方は、賠償付傷害保険（物を壊したら保証がある保険）の加入が参加の条件です。

■ 参加申込方法: web受付

現地参加ご希望の方は、**11月7日(月)まで**に下記のサイトから申し込みください。\*現地参加の申し込みを締め切りました。

Zoomウェビナー参加ご希望の方は、**11月28日(月)まで**に下記のサイトから申し込みください。

\*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。

<https://registration.ims.ac.jp/qcs2022/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29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  
(特に登録アドレスがgmailの場合は届かない場合があります。)

■ 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 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](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。

## 開催プログラム

### 12月6日(火)

司会：清野 淳司（早稲田大学）	
13:00 - 13:10	開会の挨拶 中井 浩巳（早稲田大学）
13:10 - 14:40	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」
14:55 - 16:25	中谷 直輝 先生（東京都立大学） 「電子相関とpost-HF法」
16:40 - 18:10	神谷 宗明 先生（岐阜大学） 「密度汎関数理論の基礎」
18:30 - 19:30	Web交流会

### 12月7日(水)

司会：藤田 貴敏（量子科学技術研究開発機構）	
9:00 - 10:30	金子 弘昌 先生（明治大学） 「予測的な機械学習モデルの構築およびモデルの逆解析をするための標準的な手順」
10:45 - 12:15	五十幡 康弘 先生（豊橋技術科学大学） 「電子励起状態の計算化学」
13:30 - 15:00	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」
15:15 - 16:45	田中 宗 先生（慶應義塾大学） 「量子アニーリング・イジングマシンの基礎と応用」
17:00 - 18:00	ポスター発表（現地のみ） <a href="#">ポスター発表リスト</a>

12月8日(木)

司会：江原 正博（分子研）	
9:00 - 10:30	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」
10:45 - 12:15	楊 天任 先生、中川 裕也 先生（QunaSys） 「量子コンピュータによる量子化学計算と技術系スタートアップの実際」
12:15 - 12:25	修了証の授与、閉会の挨拶
12:25 - 12:40	講師の先生との懇談