

## 第3回 量子化学ウィンタースクール

第3回 量子化学ウィンタースクール 開催のお知らせです。

第3回量子化学ウィンタースクール～基礎理論と分子物性の理論～ - J

TCCIウィンターカレッジ：量子化学>」

現在、量子化学では電子相関や相対論効果を精密に記述する緻密な電子状態理論が開発されています。これらの最先端の理論開発では、理論の基礎を熟知していることが必須になります。今回のスクールでは、この観点から基礎理論の解説を重視し、Hartree-Fock法やDirac-Fock法、Coupled Cluster法から講義するスクールを企画しました。講義では簡単な演習も行う予定です。

また電子状態理論は、様々な分子物性の解析、新しい概念の創出、機能性分子や分子デバイスの開発に有用なアプローチとして利用されています。そこで、分子物性の基礎理論やその応用について、いくつかの研究に焦点をあて、解説していただく講義も企画しています。

いずれの講義についても、最先端で研究を行っておられる先生方を講師としてお招きし、基礎から分かりやすく解説していただきます。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行います。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、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。

世話人 江原正博（分子研・計算セクター）

柳井 毅（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：2013年12月16日（月）、17日（火）

参加費：無料

懇親会：2013年12月16日（月）18:00～

分子科学研究所 職員会館1F

懇親会費（一般）3,000円、（学生）2,000円

#### ■参加申し込み

\*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(2400円/泊)を支給します。

#### ■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16日（月）

13:30 - 13:40	はじめに
	司会：倉重佑輝（分子研）
13:40 - 15:30	阿部穰里先生（首都大学東京） 「Dirac-Hartree-Fock法を中心とした相対論的量子化学法」
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17日（火）

	司会：秋永宣伸（計算科学研究機構）
9:00 - 10:50	中野雅由先生（大阪大学） 「開殻分子系の光応答物性の理論」
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	山下晃一先生（東京大学） 「太陽エネルギー変換過程の理解と予測に向けた計算化学」
15:20 - 15:30	休憩
15:30 - 17:20	福田良一先生（分子科学研究所） 「電子励起状態の量子化学 - 近赤外光の利用と溶媒効果」
17:20 - 17:30	おわりに