

## 第7回 量子化学スクール

### 第7回量子化学スクール～基礎理論と高精度理論の発展～ 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～基礎理論と高精度理論の発展～」を下記の要領で開催致します。近年の電子状態理論の発展により、非常に高精度な計算が可能となりつつあります。そこで、今回のスクールでは電子状態理論の基礎から最新の理論の発展まで学んで頂ける講習会を企画しました。具体的には分子軌道法、密度汎関数法、量子モンテカルロ法、Broken-symmetry法について解説して頂きます。さらに、物性理論分野から講師をお招きして、密度行列繰り込み群についての講義を行って頂きます。いずれの講義も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。

#### 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：岡崎コンファレンスセンター小会議室前

会期：2017年11月20日（月）～2017年11月21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：2017年11月20日（火）17:30～  
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

#### ■参加申込方法: web受付

下記のURL からご登録ください。

<https://registration.ims.ac.jp/qcs2017> 参加申込締切日：2017年11月30日（金）

#### ■宿泊について

今回は、共同利用研究者宿泊施設（ロッジ）をご利用いただけません。ご自身でホテル予約 お願いいたします。

近郊ホテルのURL <https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.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）  
往復交通費（自然科学研究機構規定額）及び宿泊費の一部を支給します。

#### ■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 分子科学研究所  
量子化学スクール担当

〒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。

## 開催プログラム

### 11月20日 (月)

13:30 - 13:40	はじめに
13:40 - 15:10	前園涼 先生 (北陸先端科学技術大学院大学) 「量子拡散モンテカルロ法を用いた第一原理多体波動関数評価と 電子状態計算」
15:30 - 17:00	北河康隆 先生 (大阪大学) 「開殻分子系へのBroken-symmetry法および近似スピン射影法の適用」
17:30 - 19:00	懇親会

### 11月20日 (火)

09:00 - 10:30	西野友年 先生 (神戸大学) 「密度行列繰り込み群」
10:50 - 12:00	受講者の研究発表 (poster)
12:10 - 13:30	昼食
13:30 - 15:00	長谷川淳也 先生 (北海道大学) 「波動関数理論による電子相関と励起状態の取り扱いについて」
15:20 - 16:50	今村穰 先生 (首都大学東京) 「密度汎関数理論の基礎」
16:50 - 17:00	おわりに