

## 第5回 量子化学ウィンタースクール

### 第5回量子化学ウィンタースクール～基礎理論～

TCCIウインターカレッジ：量子化学 計算物質科学人材育成コンソーシアム 量子化学冬の学校

現在、電子状態理論は化学の幅広い分野で活用されています。最近では、ナノ・バイオ系など複雑系への応用も可能になっています。これらの研究においては、電子状態理論の基礎を十分理解しておく必要があります。そこで今回は、電子状態理論の基礎的理解を深めることを目的としたスクールを企画しました。電子状態理論の基礎として、分子軌道法、計算アルゴリズム、化学反応理論、電子相関理論、相対論的量子化学について、解説していただきます。

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。積極的な参加をよろしくお願いいたします。

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、また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幅広い分野からのご参加をお待ちしております。

#### 世話人

江原正博（分子研・計算センター）

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  
計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）

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：2015年11月16日（月）、17日（火）

参加費：無料

懇親会：2015年11月16日（月）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

#### ■参加申込み方法：web受付

\*申し込みを締め切りました。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。

<http://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.hotel.html>

【重要】ロッジ以外の宿泊の方

領収書、宿泊証明書等、宿泊を証明するもののご提出お願いいたします。

#### ■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(2500円/泊)を支給します。

【注】手続き書類は、早急にご対応お願い致します。手続き依頼後、1か月以上未提出の場合は、旅費支給できかねる場合があります。

## ■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

### 11月16日 (月)

13:30 - 13:40	はじめに
司会：大西裕也（神戸大学）	
13:40 - 15:30	森 寛敏先生（お茶の水女子大学） 「分子軌道法の基礎」
15:30 - 15:40	休憩
15:40 - 16:40	岩田末廣先生（分子研名誉教授） 「Assembler, ALGOLから、IPython/numpy に至るお話： 道具としての計算機を駆使するために」
17:30- 19:00	懇親会

### 11月17日 (火)

司会：福田良一（分子研）	
9:00 - 10:50	常田貴夫先生（山梨大学） 「化学反応の軌道・軌道エネルギー論」
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：倉重佑輝（分子研）	
13:30 - 15:20	柳井 毅先生（分子研） 「多配置電子状態理論の基礎を中心に」
15:20 - 15:30	休憩
15:30 - 17:20	中嶋隆人先生（計算科学研究機構） 「相対論的量子化学」
17:20 - 17:30	おわりに