第14回 量子化学スクール

第14回量子化学スクール

2024年12月10 - 12日の日程で「第14回量子化学スクール」を開催します。今年度も、参加者と講師の先生方との交流の機会を考慮してハイブリッド開催とします。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。最近のトピックスとして有機合成反応開発への応用や第二量子化によるアプローチ、インフォマティクスの講義もございます。 現地ではポスター発表の機会もございますので、皆様の研究発表を期待しています。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います。 現地参加頂いた方には、修了証を発行します。部分的な参加も歓迎いたします。

世　話　人：白男川 貴史（分子研）
横川 大輔（東京大学）
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
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
協　　　賛：PCoMS（分子科学）
開 催 日 時：2024年12月10日（火）～2024年12月12日（木）
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
定　　　員：100名程度（現地参加）
500名程度（Zoomウェビナー参加）
参　加　費：無料
懇　親　会：日時：12月11日（水）18:10～19:30
会場：岡崎コンファレンスセンター（中会議室）
懇親会費：（一般）5,000円/（学生）2,500円
懇親会は予約制のためキャンセルはご遠慮下さい。
初日の受付時に集金いたします。お釣りのないようにお願いいたします。
申 込 締 切：2024年11月4日（月）まで（現地参加）
2024年12月2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、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。)
＊宿泊施設をご予約いただいた方には、メールにてご連絡いたします。
ロッジURL　https://sites.google.com/orion.ac.jp/oka-lodge/
＊ロッジ宿泊の申込予定数を超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。(宿泊費の支給はございませんので、ご了承ください。)
＊サポート可能な方には、申込締切後、所定の手続き案内メールを差し上げます。案内メールが届かなかった方は、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。
＊交通費サポートをご希望の方で、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。(2024.10.25)
＊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した。(2024.10.28)

■ 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

参加ご希望の方は下記のサイトから申し込みください。
後日スクール参加のための情報をメールにてご連絡します。
（参加登録）https://registration.ims.ac.jp/qcs2024/registration

（分子研・計算セHP）https://ccportal.ims.ac.jp/
＊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。

※12月3日にZoomウェビナーのURLと講義資料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（_at_は@に置き換えてください）

＊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10日（火）

座長：白男川 貴史	
13:00 - 13:10	開会の挨拶 中井 浩巳
13:10 - 14:40	小林 正人 先生 （北海道大学）【オンライン】 「Hartree-Fock(-Roothaan)法: 理論概要から詳細、数値結果まで」
14:55 - 16:25	中谷 佳萌 先生 （東京都立大学） 「電子相関とpost-HF法」
16:40 - 18:10	柳澤 将 先生 （琉球大学） 「密度汎関数理論: 基礎から計算適用例まで」

12月11日（水）

座長：横川 大輔	
9:00 - 10:30	齋藤 徹 先生 （広島市立大学） 「分子物性の計算」
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	南保 正和 先生（名古屋大学） 「量子化学計算を併用した有機合成反応の開発」
15:15 - 16:45	吉川 武司 先生（東邦大学） 「第二量子化で解く量子化学」
17:00 - 18:00	ポスター発表（現地参加のみ）
18:10 - 19:30	懇親会（現地参加のみ） 司会：江原 正博

12月12日（木）

座長：江原 正博	
9:00 - 10:30	石川 敦之 先生 （東京科学大学） 「量子化学計算を用いたマテリアルズ・インフォマティクス: 材料科学への応用」
10:45 - 12:15	和佐田 祐子 先生 （名古屋工業大学） 「GaussianによるSCFおよび構造最適化の実際」
12:15 - 12:25	修了証の授与、閉会の挨拶 中井 浩巳

ポスター発表

P-1	配置間相互作用法のダイアグラム	(東邦大学薬学部 1, 早稲田大学先進理工学部 2, 早稲田大学理工学術院総合研究所 3) 吉川武司1, 〇中井浩巳2,3
P-2	結合クラスター法のダイアグラム	(東邦大学薬学部 1, 早稲田大学先進理工学部 2, 早稲田大学理工学術院総合研究所 3) 〇吉川武司1, 中井浩巳2,3
P-3	エネルギー密度解析の機械学習用データセットへの応用と回帰モデルの構築	(豊橋技術科学大学情報メディア基盤センター 1, 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 2) 〇五十幡康弘1,2, Hasan Mohammad Tanvir 2, 後藤仁志1,2
P-4	ナノリアクター分子動力学法とJarzynski等式を用いた熱力学量に関する理論的考察	(早稲田大学先進理工学部 1, 早稲田大学理工学術院総合研究所 2) 〇束村晴1, 西村好史2, 中井浩巳1,2
P-5	知識グラフを用いた有機分子の円偏光発光特性の解釈に向けた検討	(早稲田大学先進理工学部 1, 早稲田大学理工学術院総合研究所 2) 〇菅波祐介1, 藤波美起登2, 中井浩巳1,2
P-6	センシング技術を用いた電子実験ノートへの化学実験自動記録手法の開発	(早稲田大学先進理工学部 1, 早稲田大学理工学術院総合研究所 2) 〇髙橋颯人1, 藤波美起登2, 中井浩巳1,2
P-7	Rh錯体触媒による2,3-2置換ベンゾフラン合成の理論的研究	(北海道大学 1, 大阪大学 2, Yale大学 3) 〇板倉央奈1, 宮崎玲1, 大野祥平2,3, 植原啓太2, 佐古真2, 有澤光弘2, 長谷川淳也1
P-8	通電下の酸素欠陥を有する金属酸化物の電子状態の変化に関する理論的研究	(北海道大学総合化学院 1, 北海道大学触媒科学研究所 2) 〇遠山竣介1, 飯田健二2, 長谷川淳也2
P-9	バーチャルルイス酸を用いたトロポンの付加環化反応の解析と触媒最適化への応用	(北海道大学大学院総合化学 1, 北海道大学大学院理学研究院 2, JST-ERATO 3, 北海道大学WPI-ICReDD 4) 〇廣瀬健1, 松岡和2,3,4, 前田理2,3,4