

現在、電子状態理論は大規模系や複雑系への適用が可能になっています。その背景には、大規模系を目指した理論開発や高並列化など、様々な取り組みがあります。今回のスクールでは電子状態理論の基礎からはじめて、これらの大規模系の理論までをカバーする講義を企画しました。具体的には、分子軌道法の基礎、有効ポテンシャル、第二量子化、分子系の磁気的性質、大規模系の理論への展開について、解説していただきます。また、講義では簡単な演習も行います。

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。積極的な参加を期待しています。

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、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

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：2014年12月15日（月）、16日（火）

参加費：無料

懇親会：2014年12月15日（月）18:00～  
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(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

### 12月15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（お茶の水大学） 「分子軌道法の基礎と相対論的有效ポテンシャル法」
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16日 (火)

	司会：今村 穰（計算科学研究機構）
9:00 - 10:50	Stephan Irle先生（名古屋大学） 「Density-Functional Tight-Binding Method for Complex Systems in Ground and Excited States」
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：大塚勇起（神戸大学）
13:30 - 15:20	青木百合子先生（九州大学） 「Elongation法の原理と機能設計への展開」
15:20 - 15:30	休憩
15:30 - 17:20	波田雅彦先生（首都大学東京） 「分子の磁氣的性質」
17:20 - 17:30	おわりに