

## 第2回 量子化学ウィンタースクール

### 第2回量子化学ウィンタースクール～基礎理論と生体系の理論～ TCCIウィンターカレッジ：量子化学

近年、高精度な電子状態理論が進展し、分光学的精度の精緻な理論研究が可能となりました。また、大規模系の理論によって、生体系

酵素反応や光電子過程についても、その起源を明らかにする研究が可能となっています。そこで、今回のスクールでは基礎理論と生体系

理論に焦点をあて、関連する電子状態理論を広く学んでいただける講習会を企画しました。最先端の研究を行っておられる先生方を講師

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企画しました。電子状態理論を志している学部学生や

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：分子科学研究所

共 催：TCCI、CMSI、計算科学研究機構、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：2012年12月17日（月）、18日（火）

参加費：無料

懇親会：2012年12月17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

\*参加ご希望の方は、**11月30日（土）**までに下記からご登録ください。

<http://www.ims.ac.jp/seminar/2012/regist121217.html>

#### ■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17日（月）

|                  |                                    |
|------------------|------------------------------------|
| 13:30 -<br>13:40 | はじめに 大峯巖分子研所長                      |
|                  | 司会：福田良一（分子研）                       |
| 13:40 -<br>15:30 | 重田育照先生（大阪大学）<br><br>「生体内化学反応解析の基礎」 |

|                  |  |
|------------------|--|
| 15:30 -<br>15:40 | 休憩   |
| 15:40 -<br>17:30 | 中辻 博先生（量子化学研究協会研究所）<br><br>「量子化学の基礎理論と生物学への応用理論」 |
| 18:00 -<br>19:30 | 懇親会  |

**12月18日（火）**

|                  |   |
|------------------|---|
| 司会：大塚勇起（神戸大）     |   |
| 9:00 - 10:50     | 長谷川淳也先生（北海道大学）<br><br>「光機能性生体分子の励起状態に関する量子化学」                   |
| 10:50 -<br>11:00 | 休憩  |
| 11:00 -<br>12:00 | 受講者の研究発表（poster）  |
| 12:00 -<br>13:30 | 昼食  |
| 司会：大西裕也（神戸大）     |   |
| 13:30 -<br>15:20 | 吉澤一成先生（九州大学）<br><br>「大規模量子化学計算による金属酵素の構造と反応の研究」                 |
| 15:20 -<br>15:30 | 休憩  |
| 15:30 -<br>17:20 | 倉重佑輝先生（分子科学研究所）<br><br>「新段階を迎える多参照電子状態理論～密度行列繰込み群<br>との融合を中心に～」 |
| 17:20 -<br>17:30 | おわりに  |