

## 第8回 量子化学スクール

### 第8回量子化学スクール ポスト「京」重点課題5 ウィンタースクール - 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

2018年12月17日から19日までの日程で自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにおいて、「第8回量子化学スクール」を開催いたします。スクールは分子科学研究所、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）、理論化学研究会の主催として行います。講義は量子化学を基礎から学んで頂けるような内容になっているため、量子化学の経験や専門知識は前提としません。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、または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おります。さらに、参加者同士の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ています。

#### 世話人

藤田貴敏（分子研）  
中井浩巳（早稲田大学）  
中嶋隆人（R-CCS）  
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  
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）  
理論化学研究会
- 共 催：理化学研究所 計算科学研究センター（R-CCS）  
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 1階  
大隅ホール <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1階中会議室前
- 会 期：2018年12月17日（月）～2018年12月19日（水）
- 定 員：100名
- 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：2018年12月18日（火）18:00～  
岡崎コンファレンスセンター 中会議室  
懇親会費（一般）3,000円、（学生）2,000円

#### ■参加申込方法: web受付

申し込みを締め切りました。多数のご登録ありがとうございました。

<https://registration.ims.ac.jp/qcs2018/registration>

参加申込受付：2018年10月1日（月）～2018年11月30日（金）

#### ■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いたします。

近郊ホテルのURL <https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

\*共同利用研究者宿泊施設（ロッジ 1泊2,500円）をご利用いただけます。  
希望される方は参加申込のロッジ希望にお申込みください。数に限りがあるため学生限定、先着順となります。

申込から1週間以内に宿泊可否をメールにて連絡いたします。

ロッジのURL <http://www.orion.ac.jp/lodge>

※申し込みが予定数を越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。予算に限りがあり先着順になりますので、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）を支給します。

\* 所定の手続き案内メールを差し上げます。

※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（2018.10.11）

#### ■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

### 12月17日（月）

	司会：藤田貴敏（分子研）
13:25 - 13:40	開会式：岩田末廣 校長
13:40 - 15:10	小林正人 先生（北海道大学） 「Hartree-Fock(-Roothaan)法: 理論概要から詳細、数値結果まで」
15:20 - 16:50	中谷直輝 先生（首都大学東京） 「電子相関とpost-HF法」
17:00 - 18:30	神谷宗明 先生（岐阜大学） 「密度汎関数理論の基礎」
18:40 - 19:40	ポスター発表

\* プログラム変更：ポスター発表は12月18日のみとなりました（2018.12.3）

### 12月18日（火）

	司会：小野純一（早稲田大）
09:00 - 10:30	福田良一 先生（京都大学） 「電子励起状態の計算化学」
10:40 - 12:10	原淵祐 先生（北海道大学） 「量子化学計算を用いた反応経路解析」
12:10 - 13:30	昼食
	司会：大越昌樹（早稲田大）
13:30 - 15:00	岸亮平 先生（大阪大学） 「量子化学に基づく分子物性の予測と解釈」

<b>15:10 - 16:40</b>	和佐田祐子 先生（名古屋工業大学） 「GaussianによるSCFおよび構造最適化計算の実際」
<b>16:50 - 17:50</b>	ポスター発表
<b>18:00 - 19:30</b>	懇親会

12月19日（水）

	司会：石村和也（分子研）
<b>09:00 - 10:30</b>	清野淳司 先生（早稲田大学） 「相対論的量子化学における理論・計算手法の基礎」
<b>10:40 - 12:10</b>	白井聡一 先生（豊田中央研究所） 「企業の材料研究における量子化学の役割」
<b>12:15 - 12:30</b>	修了証授与、閉会式：岩田末廣 校長