

第13回量子化学スクール

2023年12月5 - 7日の日程で「第13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量子コンピュータやインフォマティクスの講義もごさいます。現地ではポスター発表の機会もごさいますので、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。現地参加いただいた方には、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	藤田貴敏（量子科学技術研究開発機構） 清野淳司（早稲田大学） 横川大輔（東京大学） 中井浩巳（早稲田大学） 白男川真史（分子研） 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：2023年12月5日（火）～2023年12月7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（現地参加）  
500名（Zoomウェビナー参加）
- 参加費：無料
- 懇親会：日時：12月6日(水)17:00～18:30  
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）4,000円/（学生）2,000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。お釣りのないようお願いいたします。
- 申込締切：2023年11月6日（月）まで（現地参加）  
2023年11月27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、下記にごさいます。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。）
  - \* 宿泊施設をおとりした方にはメールにて連絡いたします。  
ロジURL <http://www.occ.orion.ac.jp/lodge/>
- \* ロジ宿泊の申込予定数を越えたためロ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。（宿泊代は支給しませんのでご了承下さい。）
  - \* 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。案内メールの届かなかつた方は、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。(2023.10.16)
- \* 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。(2023.10.24)

■ 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/qcs2023/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。

## ■ 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5日(火)

座長：清野淳司	
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) 「Hartree-Fock(-Roothaan)法: 理論概要から詳細、数値結果まで」
14:55 - 16:25	中谷 直輝 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6日(水)

座長：藤田貴敏	
9:00 - 10:30	杉崎 研司 先生 (慶応義塾大学) 「量子化学計算量子アルゴリズム」
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	岩崎 悠真 先生 (物質・材料研究機構) 「材料開発における4つのインフォマティクスと自律材料探索」
15:15 - 16:45	ポスター発表 (現地参加のみ) <a href="#">ポスター発表リスト</a>
17:00 - 18:30	懇親会 (現地参加のみ) 司会：江原正博

### 12月7日(木)

座長：白男川貴史	
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	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