

## 第11回 量子化学スクール

### 第11回量子化学スクール

2021年度も11月30日、12月1日の日程で「第11回量子化学スクール」を開催いたします。今年度は新型コロナウイルス感染拡大の影響を鑑み、オンライン開催といたしました。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おり、量子化学の経験や専門知識は前提としていません。本年度はトピックスとして量子コンピュータ、機械学習の内容も含めています。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おります

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)  
中井浩巳 (早稲田大学)  
江原正博 (分子研、計算せ)

主催：自然科学研究機構 分子科学研究所  
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  
開催方法：Zoomによるオンライン開催  
開催日：2021年11月30日(火)～2021年12月1日(水)  
参加費：無料  
申込締切：2021年11月22日(月)  
定員：500名

#### ■参加申込方法: web受付

参加ご希望の方は、**11月22日(月)まで**に下記のサイトから申し込みください。

**\*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。**

<https://registration.ims.ac.jp/qcs2021/registration>

ご登録時に登録確認メールを自動送信します。メールが届かない場合は、下記問い合わせ先へご連絡ください。  
後日スクール参加のための必要情報 (Zoom ID、PW、テキスト情報等) がメールにて配信されます。

**\*11月26日にZoomのURLと講義資料の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](mailto: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](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

11月30日(火)

司会：藤田貴敏

9:00 - 9:10 開会の挨拶 中井浩巳 (早稲田大学)

9:10 - 10:40 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」

10:50 - 12:20 中谷 直輝 先生 (東京都立大学)  
「電子相関とpost-HF法」

司会：清野淳司

14:00 - 15:30 神谷 宗明 先生 (岐阜大学)  
「密度汎関数理論の基礎」

15:40 - 17:10 福田 良一 先生 (京都大学)  
「電子励起状態の計算化学」

司会：清野淳司

17:30 - 18:30 交流会

12月1日(水)

---

司会：藤田貴敏

9:00 - 10:30 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」

10:40 - 12:10 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」

司会：藤田貴敏

14:00 - 15:30 水上 渉 先生 (大阪大学)  
「量子コンピュータを用いた量子化学計算の基礎」

15:40 - 17:10 藤波 美起登 先生 (早稲田大学)  
「機械学習の基礎と実践のためのヒント」

17:10 - 17:20 閉会の挨拶 江原正博 (分子研)

---