

6th Symposium on Electronic Structure Theory

第6回 電子状態理論シンポジウム

2020年

11月14日(土) 13:40 開場

会場 ▶ Zoom によるオンライン開催

主催 ▶ 理工学術院総合研究所プロジェクト研究

『計算化学の社会実装』

プログラム

14:00 ~ 14:10

はじめに
西村 好史 (早稲田大学 理工学術院総合研究所)

14:10 ~ 14:40

講演 001 「複雑な系のための非断熱分子動力学手法の開発とその応用」
浦谷 浩輝 (早稲田大学大学院 先進理工学研究科)

14:40 ~ 15:10

講演 002 「機械学習を用いた高精度かつ効率的な相関エネルギー予測」
藤澤 遼 (早稲田大学大学院 先進理工学研究科)

15:10 ~ 15:30

休憩

15:30 ~ 16:00

講演 003 「相対論的密度汎関数理論の開発：
picture-change 補正と相対論的交換相関汎関数」
五十幡 康弘 (早稲田大学 理工学術院総合研究所)

16:00 ~ 16:30

招待講演 I01 「演算子変換に基づく効率的で汎用的な時間発展法の開発：
3項間漸化式法」

赤間 知子 (北海道大学 大学院理学研究院 化学部門 量子化学研究室)

16:30 ~ 16:40

おわりに
中井 浩巳 (早稲田大学 先進理工学部、理工学術院総合研究所、京都大学 ESICB)

$$\Delta E^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{ij} \sum_{a,b}^{(\text{occ})} \frac{|\langle ij || ab \rangle|^2}{\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_a - \varepsilon_b}$$

$$\Psi = E\Psi$$

