

宇宙地球フロンティア実地研修 報告書

Report for Onsite Training in Earth-Space Frontier Science

氏名/Name	伊藤 颯 Ito Hayate		
所属部局/ Affiliation	理学系研究科 化学専攻 Department of Chemistry, Graduate School of Science		
研究機関・企業名 /Hosting Institution	International Union of Crystallography, University of Warsaw		
期間/Period	2023 年 11 月 7 日 11/07/2023	~	2024 年 1 月 26 日 01/26/2024 *西暦で記入 mm/dd/yyyy

・セミナーシリーズの概要

量子結晶学とは結晶学の分野の一つであり、量子化学的な手法を用いて結晶構造を分析する学問である。これには主に「量子力学的計算から得られる情報を強化するために結晶学的情報を利用する」とことと、「実験から得られる結晶学的情報を向上させるために量子化学計算を利用する」とことという二つの逆方向の意味を持っている。特に近年では計算機の能力向上により量子化学的計算が比較的容易になってきたこと、計算機科学そのものの大幅な発展と各研究者の計算リソースへのアクセスのしやすさが橋上してきたことに伴ってさまざまな解析手法が次々に開発されつつあり、その応用可能な対象もどんどん広がってきている。

本セミナーシリーズは IUCr の量子結晶学委員会が主だって企画し、ワルシャワ大学などの協力を得て、量子結晶学及びその周辺分野の研究者が 1 時間ほどの講義を行う。自分は主に 2023 年 11 月、12 月、2024 年 1 月に行われた Lecture 31~35 を聴講した。

Quantum crystallography is a branch of crystallography that uses methods of quantum chemistry to analyze crystal structures. It has two major meanings, and their directions are diametrically opposed: "to improve the information obtained from quantum mechanical calculations by using crystallographic information" and "to improve the crystallographic information obtained from experiments by using quantum chemical calculations". In recent years, in particular, quantum chemical calculations have become relatively easy to perform due to improvements in computer performance, and by the remarkable development of computer science itself and the increased availability of computational resources to researchers, the potential applications of these methods are rapidly expanding.

This seminar series, organized by IUCr's Quantum Crystallography Committee and supported by the University of Warsaw and others, consists of one-hour lectures by researchers in quantum crystallography and related fields. I mainly attended Lectures 31~35 in November and December 2023 and January 2024.