

## スーパーコンピュータワークショップ2022

### 「複雑電子状態の理論・計算科学」

開催日: 2023年1月16日(月) - 17日(火)

開催方法: オンライン開催 (一部ハイブリッド: 研究棟201号室)

参加費: 無料

定員: 300名

計算科学研究センターでは、スーパーコンピュータシステムを全国の研究者の方々に利用して頂いています。今年度は、2023年度当センターでは、研究交流を目的として、例年、理論・計算分子科学に関するワークショップを開催してきております。今年度は、昨年度は、2つのアプリケーションプログラムをライブラリにご登録いただいております。今後、ユーザーの皆様にご活用いただく幅広い研究分野から、皆様のご参加をお待ちしております。

参加希望者の方は下記参加登録申し込みページより必要事項をご記入の上、お申し込みください。

\* 参加のための必要情報 (Zoom ID、PW情報等) はメールにてご連絡いたします。

#### プログラム (\*敬称略)

##### 1日目 2023年1月16日(月)

13:30-13:40	開会の挨拶 渡辺芳人 分子研所長	
13:40-14:20	望月祐志 (立教大学) 【ライブラリ登録: ABINIT-MP】	「FMOプログラムABINIT-MPの現状と今後」
14:20-15:00	北河康隆 (大阪大学)	「多核金属錯体の機能発現機構解明に向けた量子化学的アプローチ」
15:00-15:40	長谷川淳也 (北海道大学)	「系間交差を含む触媒反応経路に関する理論的研究」
15:40-15:50	休憩	
15:50-16:30	清野淳司 (早稲田大学)	「量子化学計算と人工知能技術の融合」
16:30-17:10	波田雅彦 (東京都立大学)	「相対論的電子状態理論の開発とNMR化学シフトの計算」

##### 2日目 2023年1月17日(火)

09:30-10:10	土持崇嗣 (神戸大学)	「人工光合成触媒の理解を目指した半導体表面計算」
-------------	-------------	--------------------------

10:10-10:50	藤田貴敏（量子科学技術研究開発機構）	「大規模電子状態計算を用いた有機半導体材料の光電変換効率の向上」
10:50-12:00	ポスターセッション（オンライン）	
12:00-13:30	昼食	
13:30-14:10	西村好史（早稲田大学）【ライブラリ登録：DCDFTBMD】	「量子的分子動力学計算プログラムDCDFTBMDの開発と応用」
14:10-14:50	柳井 毅（名古屋大学）	「ニューラルネットワーク符号化波動関数計算の量子化学への応用」
14:50-15:00	閉会の挨拶	

#### ポスター発表

P-1	酵素反応のQM/MM解析	(筑波大学) ○庄司光男
P-2	アミノ酸シッフ塩基銅(II)錯体の系統的な励起状態計算	(東京理科大学大学院) ○宮崎亮太郎
P-3	ビリル還元酵素PcyA-ビリベルジンIX $\alpha$ 複合体の計算科学的研究	(茨城大学大学院) 萬代充裕, 飯島愛璃, ○坪優佳, 海野昌喜, 城塚達也, 森聖治
P-4	相対論的EOM-CC法を用いたCHFCIBr分子の電子励起状態計算: パリティを破る鏡像異性体間エネルギー差の増大	(京都大学) ○黒田直也, 砂賀彩光, 瀬波大土

参加登録は以下のリンクよりお願いします

<https://registration.ims.ac.jp/scws2022/registration>

#### ■ ポスター発表

Zoom ブレイクアウトルームを用いた個別プレゼン形式で行います。

ポスター発表では分子科学の幅広い研究分野からの発表を期待しています。

#### ■ 参加申込締切(ポスター発表有り)

2023年1月11日(水) 24:00

発表者リストと発表タイトルが登録時に必要です。

#### ■ 参加申込締切(ポスター発表無し)

随時受け付けておりますが、余裕を持ってご登録ください。

#### ■ お問い合わせ

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  
愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地

TEL: 0564-55-7462

FAX: 0564-55-7025

Email: rccs-scws2022\_at\_ims.ac.jp

\*メールアドレス内の\_at\_は@に直してお送りください。

\*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。無断転載等はお断りいたします。