

# 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、20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、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子」
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」
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」
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	アミノ酸シップ塩基銅(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	ビリン還元酵素PcyA-ビリベルシン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, 瀬波大士

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。