

## 「第5回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」 「TCCIウィンターカレッジ - 分子シミュレーション -」

### 「第5回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」 「TCCIウィンターカレッジ - 分子シミュレーション -」

2011年12月12日から15日までの4日間の日程で自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにおいて、分子科学研究所、計算分子科学研究拠点 (TCCI) の主催、分子シミュレーション研究会の共催で「第5回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」 「TCCIウィンターカレッジ - 分子シミュレーション -」を開催いたします。

講義は学部卒業程度の知識があれば理解できるような内容となっており、特にシミュレーションの経験や専門知識は前提としていません。これから分子シミュレーションを始めようとしておられる学部学生や大学院生、または実験家や企業の研究者など、計算科学に興味がある方々のご参加をお待ちしております。

世話人 名古屋大学 岡崎 進  
名古屋大学 吉井範行  
分子科学研究所 奥村久士

主催：自然科学研究機構 分子科学研究所、 計算分子科学研究拠点 (TCCI)

共催：分子シミュレーション研究会、計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

会場：岡崎コンファレンスセンター2階 小会議室

<http://www.orion.ac.jp/occ/>

会期：2011年12月12日 (月) ~12月15日 (木)

参加費：無料

懇親会：12月13日 (火) 18:30~自然科学研究機構 職員会館1階 食堂ホール

懇親会費 (一般) 5,000円 / (学生) 4,000円

#### ■宿泊について (三島ロッジ)

\*ロッジは部屋に限りがあり、先着順とします。\*ロッジは満室となりました。

\*ホテル宿泊の方は、各自でホテルの宿泊の手配をしてください。

下記URLをご参考ください。

<http://www.ims.ac.jp/location/hotel.html>

#### ■旅費・宿泊費のサポートについて

\*学生限定(予算に限りがありますので、ご希望に添えない場合もあります)

\*往復交通費(自然科学研究機構規定額)及び宿泊費の一部(2400円/泊)を支給します。

■学生の方は、賠償付障害保険の加入が参加の条件です。

参加ご希望の方は、11月30日 (水) までに下記からご登録ください。

**11月30日12時**をもって参加申し込みを締め切りました。

多くの方のご参加、ありがとうございました。

#### ■分子シミュレーション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 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター

分子シミュレーションスクール担当

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

E-mail: [school\\_at\\_draco.ims.ac.jp](mailto:school_at_draco.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

##### 2011年

第1日目：12月12日 (月)

13:00-13:45 受付開始

13:45-14:00 開会式

樋渡保秋先生 (金沢大学名誉教授)

「シミュレーションスクールについて (挨拶)」

14:00-15:30 松本充弘先生(京都大学)

「シミュレーションの全体像・概論」

15:40-17:10 篠田渉先生（産業技術総合研究所）

「数値解法・シミュレーション手法論一般、リウビル演算子、Ewald法」

17:20-17:50 高塚和夫先生（東京大学）

「分子研・計算分子科学拠点とクラスターダイナミクス」

## 第2日目：12月13日（火）

9:00-10:30 三上益弘先生（産業技術総合研究所）

「原子間・分子間相互作用エネルギー関数」

10:40-12:10 奥村久士先生（分子科学研究所）

「各種アンサンブルの生成法、拡張アンサンブル法」

12:10-13:30 昼食

13:30-15:00 岡崎進先生（名古屋大学）

「分子シミュレーションに基づいた自由エネルギー計算」

15:10-16:40 森下徹也先生（産業技術総合研究所）

「第一原理分子動力学法」

16:50-18:20 吉井範行先生（名古屋大学）

「並列化」

18:30-20:30 懇親会 挨拶：大峯 巖先生（分子科学研究所長）

挨拶：上田 顕先生（京都大学名誉教授）

## 第3日目：12月14日（水）

9:00-10:30 古石貴裕先生（福井大学）

「核生成、気泡生成」

10:40-12:10 宮田竜彦先生（愛媛大学）

「RISM理論を用いたMDシミュレーション」

12:10-13:30 昼食

13:30-14:15 南 一先生（理化学研究所）

「京コンピュータについて（仮題）」

14:30-16:00 高橋英明先生（東北大学）

「QM/MM-ER法」

16:10-17:40 長岡正隆先生（名古屋大学）

「溶液化学反応」

## 第4日目：12月15日（木）

9:00-10:30 泰岡顕治先生（慶應義塾大学）

「古典力学・拘束系の力学（分子の取扱い）」

10:40-12:10 玉井良則先生（福井大学）

「高分子のシミュレーション」

12:10-12:30 閉会式

\*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。