

## 「第6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6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 - 」

2012年12月11日から14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、「第6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：2012年12月11日（火）～12月14日（金）

参加費：無料

懇親会：12月12日（水）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

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。（共同利用研究者宿泊施設は利用できません）

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

#### ■旅費・宿泊費の支給について

\*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（金）までに下記からご登録ください。

<https://registration.ims.ac.jp/mss2012/overview>

(参加申込みにはユーザー登録が必要です)

(( (

#### ■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 分子科学研究所

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:0564-55-7273

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

### 12月11日（火）

|             |      |
|-------------|------|
| 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）<br>「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）<br>「シミュレーションの全体像・概論」              |
| 15:40-17:10 | 吉井範行先生（名古屋大学）<br>「力学、解析力学、数値解法、拘束動力学」          |
| 17:20-18:50 | 松林伸幸先生（京都大学）<br>「統計熱力学の概要」                     |

## 12月12日（水）

|             |   |
|-------------|---|
| 9:00-10:30  | 古石貴裕先生（福井大学）<br>「MD計算の解析」                         |
| 10:40-12:10 | 三上益弘先生（筑波大学）<br>「原子間・分子間相互作用エネルギー関数と長距離力計算法」      |
| 12:10-13:30 | 昼食  |
| 13:30-15:00 | 奥村久士先生（分子科学研究所）<br>「各種統計アンサンブルの生成法、拡張アンサンブル法」     |
| 15:10-16:40 | 岡崎進先生（名古屋大学）<br>「分子シミュレーションに基づいた自由エネルギー計算」        |
| 16:50-18:20 | 長岡正隆先生（名古屋大学）<br>「化学反応と分子シミュレーション—気相反応から溶液化学反応へ—」 |
| 18:30-20:30 | 懇親会   |

## 12月13日（木）

|             |   |
|-------------|---|
| 9:00-10:30  | 篠田渉先生（産業技術総合研究所）<br>「階層的分子モデルによるMD—全原子モデルを元にした粗視化分子モデルの構築—」 |
| 10:40-12:10 | 渡辺宙志先生（東京大学）<br>「短距離古典分子動力学計算の高速化と大規模並列化」                   |
| 12:10-13:30 | 昼食  |
| 13:30-15:00 | 泰岡顕治先生（慶應義塾大学）<br>「核生成・相転移・界面張力の化学物理」                       |
| 15:10-16:40 | 池口満徳先生（横浜市立大学）<br>「生体系の分子シミュレーション」                          |
| 16:50-18:20 | 川上智教先生（東レ㈱）<br>「高分子材料設計における分子シミュレーション—高分子電解質膜の例を中心に—」       |

## 12月14日（金）

|             |  |
|-------------|--|
| 9:00-10:30  | 三浦伸一先生（金沢大学）<br>「経路積分分子動力学法」           |
| 10:40-12:10 | 甲賀研一郎先生（岡山大学）<br>「溶液・界面の統計力学とシミュレーション」 |
| 12:10-12:30 | 修了書授与および閉会式                            |