

## 「第7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7回分子シミュレーションスクールの参加募集を開始しました。

「第7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 -」

2013年10月23日から25日までの3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、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)の共催で「第7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 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：2013年10月23日 (水) ～10月25日 (金)

参加費：無料

懇親会：10月24日 (木) 18:30～20:30

懇親会会場が変更になりました。変更日2013年9月9日

萬珍軒本店 <http://www.manchin.co.jp/>

岡崎市康生通東2-53 マイクロバス送迎、帰りは名鉄東岡崎駅まで。(所要時間約10分)

懇親会費 (一般) 5,000円 / (学生) 4,000円

## プログラム

「第7回分子シミュレーションスクール」 「TCCIウィンターカレッジ」プログラム

第1日目：10月23日 (水)

8:45- 9:00	受付
9:00- 9:15	開会式 樋渡 保秋先生 (金沢大学名誉教授) 挨拶
9:15- 10:45	松本充弘先生 (京都大学) 「シミュレーションの全体像・概論」
10:55- 12:25	森田明弘先生 (東北大学) 「コンピュータシミュレーションと理論化学」
12:25- 13:45	昼食
13:45- 15:15	吉井範行先生 (名古屋大学) 「力学、解析力学、数値解法、拘束力学」
15:25- 16:55	松林伸幸先生 (京都大学) 「統計熱力学の概要」

16:55- 18:35	奥村久士先生（分子科学研究所） 「各種統計アンサンブルの生成法、拡張アンサンブル法」
-----------------	---

## 第2日目：10月24日（木）

9:00- 10:30	三上益弘先生（慶応義塾大学） 「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」
10:40- 12:10	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」
12:10- 13:30	昼食
13:30- 15:00	長岡正隆先生（名古屋大学） 「化学反応と分子シミュレーション—気相分子の素反応から分子凝集状態の複合化学反応へ—」
15:10- 16:40	北尾彰朗先生（東京大学）「集団座標による分子シミュレーションの解析」
16:50- 18:20	林重彦先生（京都大学）「生体系のQM/MM法」
18:30- 20:30	懇親会 上田 顕先生（京都大学名誉教授） 挨拶

## 第3日目：10月25日（金）

9:00- 10:30	篠田渉先生（産業技術総合研究所） 「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	三浦伸一先生（金沢大学）「経路積分分子動力学法」
12:10- 13:30	昼食
13:30- 15:00	山本量一先生(京都大学)「非平衡分子動力学シミュレーション」
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	兵頭志明先生（兵庫県立大学）「材料のシミュレーション」
18:20- 18:35	修了書授与および閉会式

### ■宿泊について

\*各自でホテルの予約をお願いします。共同利用研究者宿泊施設（ロッジ）の利用はできません。近郊ホテルの案内は、下記URLをご参考ください。

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

### ■交通費のサポートについて

\*学生限定(予算と人数に限りがあり先着順となります。ご希望にそえない場合もございます。)

\*往復交通費(自然科学研究機構規定額)を支給します。

\*所定の手続きをしていただき、一、二か月後、口座振り込みとなります。

■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9月30日（月）までに、下記からご登録ください。募集終了

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事務局

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

※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。