

## 「第8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8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 -」

2014年10月14日から17日まで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「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 分子科学研究所 奥村久士  
名古屋大学 吉井範行

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

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

会期：2014年10月14日（火）～10月17日（金）

参加費：無料

懇親会：10月16日（木）18：30～

萬珍軒本店 岡崎市康生通東2-53 マイクロバス送迎 帰路は名鉄東岡崎駅まで送ります。所要時間約10分

懇親会費 （一般）5,000円 / （学生）4,000円

予約制のためキャンセルはご遠慮下さい。不参加でもお支払いただく場合がございます。

初日の受付時に集金いたします。お釣りのないようお願いいたします。

### 「第8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：2014年10月14日（火）

13:15-13:45 受 付

13:45-14:00 開会式 挨拶：分子科学研究所 大峯巖所長

14:00-15:00 樋渡保秋先生（金沢大学名誉教授）

「計算科学の新規性（先進性）と脆弱性「これまで」から「これから」を予測する」

15:10-16:40 松本充弘先生(京都大学)「シミュレーションの全体像・概論」

16:50-18:20 松林伸幸先生(大阪大学)「統計熱力学の概要」

#### 第2日目：2014年10月15日（水）

9:00-10:30 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」

10:40-12:10 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」

12:10-13:30 昼 食

13:30-15:00 三上益弘先生(慶應義塾大学)

「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」

15:10-16:40 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」

16:50-18:20 篠田渉先生(名古屋大学)

「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」

**第3日目：2014年10月16日（木）**

9:00-10:30 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」

10:40-12:10 志賀基之先生（日本原子力研究開発機構） 「レアイベント関連」

12:10-13:30 昼 食

13:30-15:00 岡本祐幸先生(名古屋大学) 「分子シミュレーションにおける拡張アンサンブル法」

15:10-16:40 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」

16:50-18:20 安藤嘉倫先生(名古屋大学) 「分子シミュレーションの高速・並列化」

18:30-20:30 懇親会 挨拶：上田顕先生（京都大学名誉教授）

**第4日目：2014年10月17日（金）**

9:00-10:30 三浦伸一先生(金沢大学) 「経路積分分子動力学法」

10:40-12:10 高橋英明先生（東北大学） 「QM/MM-ER法」

12:15-12:30 閉会式・修了書授与 挨拶：分子シミュレーションスクール校長 樋渡保秋先生

**■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23日（火）までに、下記からご登録ください。

参加申込みにはユーザー登録が必要です。

<https://registration.ims.ac.jp/mss2014/user/register>

参加登録は こちらです

**■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。

■当日の写真はこちらからダウンロードできます。

<https://ccportal.ims.ac.jp/msschool/photo2014>