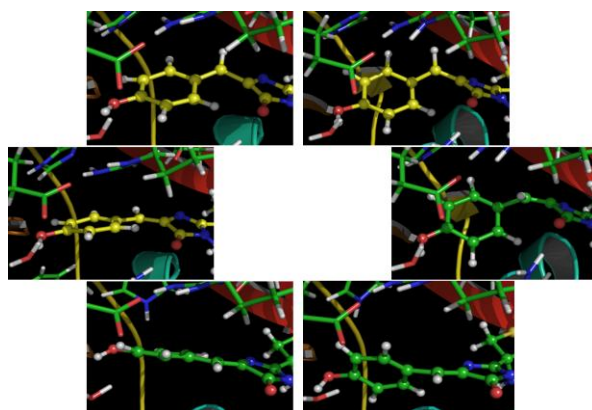


Supercomputer Workshop 2011

分子科学プログラムライブラリの充実にむけて



2011年1月24日(月)～25日(火)

自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

講演 …	岡崎コンファレンスセンター	大会議室
懇親会 …	同	中会議室
ポスター発表 …	同	中会議室

プログラム

1月24日(月)	
13:30 – 13:40	はじめに 平田文男(計算科学研究センター長)
座長 福田良一	
13:40 – 14:20	奥村久士(計算科学研究センター)、水谷文保(計算科学研究センター) 「IMS ライブラリ構想」
14:20 – 15:00	中井浩巳(早稲田大) 「電子状態理論の理論開発とプログラム公開 :分割統治(DC)法の GAMESS 実装を例に」
15:00 – 15:20	休憩
座長 石田干城	
15:20 – 16:00	塚田 捷(東北大) 「表面・界面・ナノ構造の理論と計算科学のアプローチ」
16:00 – 16:40	信定克幸(分子研) 「ナノ構造体における電子・電磁場ダイナミクスの大規模並列化計算」
16:40 – 17:20	南部伸孝(上智大) 「インドリルマレイミド誘導体による蛍光標識タグ分子の理論的解析」
17:20 – 18:30	ポスター発表
18:30 – 20:30	懇親会 挨拶 平田文男(計算科学研究センター長)

1月25日(火)	
座長 福田良一	
9:00 – 9:40	斉藤真司 (分子研) 「多時間相関関数を用いた凝縮系反応ダイナミクスの理論研究」
9:40 – 10:20	Arend G. Dijkstra (京都大) "Excitation dynamics in a complex environment : hierarchy of equations of motion"
10:20 – 10:40	休憩
座長 金剛	
10:40 – 11:20	奥村光隆 (大阪大) 「擬縮重多電子系の電子状態の量子化学計算」
11:20 – 12:00	武次徹也 (北海道大) 「非断熱効果とトンネル効果を実装した ab initio ダイナミクスの展開」
12:00 – 13:30	昼食
座長 伊藤 暁	
13:30 – 14:10	岡本祐幸 (名古屋大) 「レプリカ交換法プログラム:REM」
14:10 – 14:50	岡崎 進 (名古屋大) 「全原子分子動力学計算によるミセル、脂質膜系の構造と動力学」
14:50 – 15:10	休憩
座長 田代基慶	
15:10 – 15:50	横川大輔 (大阪大) 「溶液の理論化学:積分方程式理論に基づいた手法の開発と応用」
15:50 – 16:30	中辻 博 (量子化学研究協会) 「予言的量子化学の基礎と SAC-CI 科学の展開」
16:30 – 16:40	おわりに 江原正博 (計算科学研究センター)

ポスター発表

会場〈岡崎コンファレンスセンター 中会議室〉

お願い: 展示されたポスターは、1月25日午前中までに各自でお取り下さい。

- P01 光非依存型プロトクロロフィリド還元酵素中の補因子[4Fe-4S]クラスターの酸化還元反応における電子構造の理論的研究
○鷹野 優、米澤康滋(大阪大蛋白質研究所)、藤田祐一(名古屋大院生命農学)、栗栖源嗣、中村春木(大阪大蛋白質研究所)
- P02 ONIOM法を用いたスピン制限法とスピン射影法の結合
○北河康隆、斎藤 徹、片岡祐介、中西康之、安田奈都美、川上貴資、山中秀介、奥村光隆(大阪大院理)
- P03 第一原理計算によるセレンの鎖間相互作用の研究
○松井正冬(京都大院理)
- P04 球状ガウス波束を用いた水の準量子的MDシミュレーション: 水素結合の組み換えに伴う核の量子揺らぎのメカニズム
○小野純一、安藤耕司(京都大院理)
- P05 重水中アジ化物イオンの振動ダイナミクス温度依存性
○田山純平、石原茜衣、伴野元洋、太田 薫、齊藤真司、富永圭介(神戸大)
- P06 フォーजाサイト型ゼオライトによるホルムアルデヒドの反応性制御に関する理論化学的考察
○富田 満(東京大院理)、尾中 篤(東京大院総合文化)
- P07 III-V族-IV族化合物半導体合金の構造及びバンドギャップに関する理論的研究
○河合宏樹、Giacomo Giorgi、山下晃一(東京大院工)
- P08 量子化学理論によるナノシステムシミュレーション
○Stephan Irle(名古屋大)

- P09 Electronic Properties of $M_2(C_2)_n@C_{82}$ ($M=Sc \& Ti \& Fe$) Endohedral Metallofullerenes
○西本佳央、Stephan Irle(名古屋大院理)
- P10 DFTB/MD simulations of the oxidative opening process in capped (5&5) and (9&0) SWCNTs
○原 裕訓、Stephan IRLE(名古屋大院理)
- P11 MS-CASPT2法による核酸塩基の無輻射失活過程の研究
○山崎祥平、武次徹也(北海道大院理)
- P12 選択COメタン化反応の反応機構に関する理論的研究
○八木 清、陳愛華、宮尾敏広、東山和寿、渡辺政廣(山梨大)
- P13 局所応答分散力(LRD)法のGAMESSへの実装
○五十幡康弘、中井浩巳(早稲田大)
- P14 DC-UHF&DC-UMP2法のGAMESSへの実装とアセスメント
○吉川武司、小林正人、中井浩巳(早稲田大)
- P15 3D-RISMプログラムの高速化
○丸山 豊、吉田紀生、平田文男(分子研)
- P16 FMO/RISMおよびQM/MM/RISMプログラムの開発
○吉田紀生、平田文男(分子研)
- P17 金属表面上の触媒反応と光電子スペクトルに関する理論的研究
○江原正博、Songwut Suramitr、福田良一、中辻 博(分子研・総研大、Kasetsart大学、QCRI)
- P18 ファンデルワールスレプリカ交換法の小ペプチドへの応用
○伊藤 暁、奥村久士(分子研)
- P19 並列RI-MP2計算プログラムのGAMESSへの実装
○河東田道夫、永瀬 茂(分子研)

- P20 SAC and SAC-CI method in the polarizable continuum model
○福田良一(分子研)
- P21 10-Hydroxybenzo[h]quinolineにおける励起状態プロトン移動反応に関する理論的研究
○東 雅大、齊藤真司(分子研)
- P22 二重内殻イオン化した分子の二段階Auger崩壊
○田代基慶、江原正博(分子研)

平成23年度 利用申請A(CPU時間1000時間)随時受付中
Gaussian、AMBER、GAMESS、Molpro 等ライブラリ充実！
利用資格、申請方法など詳しくは、下記のWebページをご覧ください。

<https://ccportal.ims.ac.jp/node/42>

問い合わせ先 Email: ccadm@draco.ims.ac.jp

電話:0564-55-7462

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