

Version 2007/01/29

計算科学研究センター スーパーコンピュータ ワークショップ 2007

日時：2007年2月27日(火)～28日(水)

場所：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

2月27日(大会議室)

13:20-13:30 はじめに 岡崎進(計算科学研究センター長)

座長 永瀬茂

13:30-14:20 基調講演

諸熊奎治(京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー)

「複合分子系の複合分子理論によるシミュレーションを目指して」

14:20-15:00 藪下聡(慶応義塾大学理工学部教授)

「スピン軌道CI法による分子の解離課程の理論計算」

15:00-15:40 加藤重樹(京都大学理学研究科教授)

「溶液内、タンパク質場における化学反応の理論的研究」

15:40-16:00 休憩

16:00-17:40 パネルディスカッション「計算科学研究センターの将来像を考える」

パネラー：

加藤重樹(京都大学理学研究科教授)

中井浩巳(早稲田大学理工学部教授)

平田文男(分子科学研究所教授)

樋渡保秋(金沢大学名誉教授)

諸熊奎治(京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー)

藪下聡(慶応義塾大学理工学部教授)

司会：岡崎進(計算科学研究センター長)

18:00-20:00 懇親会(中会議室)

参加費：一般4,000円 学生2,000円

Version 2007/01/29

2月28日(中会議室)

座長 森田明弘

9:00-9:50 基調講演

中村宏樹(分子科学研究所所長)

「化学動力学理論将来(?)—量子効果の重要性と分子機能の開発・制御」

9:50-10:30 田中秀樹(岡山大学自然科学研究科教授)

「水、氷、包接水和物の構造とダイナミクスに関する理論研究」

10:30-10:50 休憩

座長 北浦和夫

10:50-11:30 榊茂好(京都大学工学研究科教授)

「遷移金属元素を含む複合電子系の理論的研究」

11:30-12:10 押山淳(筑波大学数理物質科学研究科教授)

「密度汎関数理論によるナノ・バイオ計算」

12:10-13:30 昼食

座長 斉藤真司

13:30-14:10 平尾公彦(東京大学工学系研究科教授)

「大規模分子系の理論計算に向けて」

14:10-14:50 岡本祐幸(名古屋大学理学研究科教授)

「生体分子系の拡張アンサンブルシミュレーション」

14:50-15:30 中辻博(京都大学工学研究科教授)

「正確な予言学としての量子化学の確立」

15:30-15:40 おわりに 斉藤真司(分子科学研究所教授)