

## 「第18回分子シミュレーションスクール」

### 第18回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -

8月28日(水)～8月30日(金)の3日間の日程で、「第18回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」を開催いたします。今年度も昨年度に引き続き、岡崎コンファレンスセンターでの対面とオンラインの\*ハイブリッド開催となります。

毎回好評を博しており、当スクールからは大学や企業にて分子シミュレーションを専門とされる研究者の方々が多数輩出されています。今回も例年に負けず劣らずの気鋭の先生方によります基礎から最新のトピックスに至る講義が目白押しです。講義内容は学部卒業程度の知識があれば理解できるようになっており、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。お誘いあわせの上、ふるってご参加ください。

世話人: 岡崎圭一 (分子科学研究所)、大貫隼 (分子科学研究所)、奥村久士 (分子科学研究所)

主催: 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学会

共催: 溶液化学研究会、計算物質科学人材育成コンソーシアム (分子科学)

開催日時: 2024年8月28日(水)～8月30日(金) \*学習効果の観点から全期間の参加を推奨します。

\*開催場所: 岡崎コンファレンスセンター <https://sites.google.com/orion.ac.jp/occ/>

定員: 100名(現地参加形式)、500名(Zoomウェビナー参加形式)

参加費: 無料

\*懇親会:

日時: 8月29日(木)18:30～20:00

会場: 岡崎コンファレンスセンター

懇親会費: (一般) 5,000円/ (学生) 2,500円

懇親会は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。

申込締切: 2024年7月31日(水)まで(現地参加形式)、8月15日(木)まで(Zoomウェビナー参加形式)

\*定員になり次第、締め切りとさせていただきます。例年応募が殺到しますので、お早めにお申し込みください。

\*現地参加形式における交通費サポートは、予算に限りがあるため上記日程より早く打ち切られます。お早めにお申し込みください。

今回は以下の先生方に講義していただきます。講師の先生方は現地参加される予定となっています。

**\*強い台風の接近のため、全日程オンラインで実施することになりました。懇親会は中止と致します。**

#### ■プログラム \*敬称略

| 第1日目: 8月28日(水) |                           | 講師                 | 座長  |
|----------------|---------------------------|--------------------|-----|
| 9:20 - 9:30    | 開会の挨拶                     | 岡崎 進 (横浜市立大学)      |     |
| 9:30 - 10:40   | 分子シミュレーションの全体像・概論         | 松本 充弘 (京都大学)       | 世話人 |
| 10:50 - 12:00  | 統計力学                      | 甲賀 研一郎 (岡山大学)      | 松本  |
| 12:00 - 13:00  | 昼食                        |                    |     |
| 13:00 - 14:10  | 原子間・分子間相互作用エネルギー関数【オンライン】 | 三上 益弘 (慶応義塾大学)     | 世話人 |
| 14:20 - 15:30  | 力学、解析力学、数値解法、拘束動力学        | 吉井 範行 (信越化学工業(株))  | 世話人 |
| 15:40 - 16:50  | 各種統計アンサンブルの生成法            | 奥村 久士 (生命創成探究センター) | 吉井  |
| 17:00 - 18:10  | 自由エネルギー計算                 | 松林 伸幸 (大阪大学)       | 奥村  |

| 第2日目: 8月29日(木) |   | 講師               | 座長  |
|----------------|---|------------------|-----|
| 9:30 - 10:40   | 分子シミュレーションと反応速度論・マルコフモデル                          | 岡崎 圭一 (分子科学研究所)  | 世話人 |
| 10:50 - 12:00  | 材料開発における分子シミュレーション活用 - 実験と理論の協調 -                 | 松本 茂紀 ((株)日立製作所) | 岡崎  |
| 12:00 - 13:00  | 昼食  |                  |     |
| 13:00 - 14:10  | 拡張アンサンブル法による分子シミュレーション【オンライン】                     | 岡本 祐幸 (名古屋大学)    | 世話人 |
| 14:20 - 15:30  | 分子シミュレーションと理論化学                                   | 森田 明弘 (東北大学)     | 世話人 |
| 15:40 - 16:50  | 複雑分子系のメソスコピック分子シミュレーション                           | 高田 彰二 (京都大学)     | 世話人 |
| 17:00 - 18:10  | 化学反応と分子シミュレーション<br>- 実在複合反応系の計算分子技術に向けて - 【オンライン】 | 長岡 正隆 (名古屋大学)    | 高田  |

|               |     |
|---------------|-----|
| 18:30 - 20:00 | 懇親会 |
|---------------|-----|

| 第3日目：8月30日（金） |                          | 講師           | 座長  |
|---------------|--------------------------|--------------|-----|
| 9:30 - 10:40  | シミュレーションと機械学習を用いた分子の自動設計 | 津田 宏治 (東京大学) | 世話人 |
| 10:50 - 12:00 | 粗視化分子モデルとその応用            | 篠田 渉 (岡山大学)  | 津田  |

#### ■宿泊について

\*近郊ホテルのご案内は、下記にございます。ホテル宿泊は、ご自身で予約お願い致します。

近郊ホテルURL <https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

\*共同利用研究者宿泊施設（三島ロッジA・I・N室のみ）1泊2600円をご利用いただけます。希望される方は参加登録のロッジ希望にお申込みください。

（部屋数に限りがあるため先着順。宿泊が必要な遠方の方を優先としますのでご了承下さい。）

\*宿泊施設をおとりした方には申込から1週間以内にメールにて連絡いたします。

ロッジURL <https://sites.google.com/orion.ac.jp/oka-lodge/>

\*ロッジ宿泊の申込予定数を越えたためロッジの宿泊受付を終了します。申し訳ございません。

#### ■交通費のサポートについて

\*学生限定（学部生も可。予算に限りがあり、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）を支給します。（宿泊代は支給しませんのでご了承下さい。）

\*サポート可能な方には申込締切後、所定の手続き案内メールを差し上げます。案内メールの届かなかった方は、申し訳ありませんがサポート致しかねますのでご了承下さい。

\*交通費サポート希望の方で、飛行機をご利用される方は、その旨「連絡事項」にご記入下さい。（領収書・航空券明細・搭乗券半券(搭乗証明書)の提出が必要となります。）

移動距離が短い場合や開催日より離れて搭乗日がある場合は支払の対象外となります。

\*予算に達したため交通費のサポート受付は終了しました。(2024.7.16)

\*サポート可能な方に、所定の手続き案内メールを差し上げました。(2024.7.18)

■学生の方は、賠償付傷害保険（物を壊したら保証がある保険）の加入が参加の条件です。

#### ■参加登録

現地参加ご希望の方は、**7月31日（水）正午**までに下記からご登録ください。\*現地参加の申し込みを締め切りました。

Zoomウェビナー参加(オンライン)ご希望の方は、**8月15日（木）正午**までに下記からご登録ください。

\*申し込みを締め切りました。多数の登録ありがとうございました。

<https://registration.ims.ac.jp/mss2024/registration>

ご登録時に登録確認メールを自動送信します。メールが届かない場合は、迷惑メールフォルダ等をご確認の上、下記問い合わせ先へご連絡ください。

（特に登録アドレスがgmailの場合は届かない場合があります。）

後日スクール参加のための必要情報（Zoom ID、PW、テキスト情報等）がメールにて配信されます。

\*8/20に開催情報及び講義テキストに関するメールを参加登録者に2通送信しました。

メールが届いていない方はスクール事務局school@draco.ims.ac.jpへメールでご連絡下さい。（特に登録アドレスがgmailの場合は届かない場合があります。）

#### ■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

〒444-8585 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。