

## スーパーコンピュータワークショップ2014のご案内

### 「計算化学の最新の成果と展開」

日時	平成 26年 1月21日(火) 14:00 ~ 22日(水) 12:40
会場	自然科学研究機構 <a href="#">岡崎コンファレンスセンター</a>
参加費	無料

「スーパーコンピューター ワークショップ2014」は終了しました。

### スーパーコンピューターワークショップ2014のご案内

#### 「計算化学の最新の成果と展開」

日時 平成 26年 1月21日(火) 14:00 ~ 22日(水) 12:40

会場 自然科学研究機構 [岡崎コンファレンスセンター](#)

参加費 無料

当計算科学研究センターは、スーパーコンピューターシステムを全国の研究者の皆様にご利用して頂いております。当センターのシステムの高速かつ大規模な計算環境は、分子科学、物性科学、生物科学などを含む様々な分野の研究に活用されています。

また、当センターでは例年、計算分子科学に関するワークショップを開催しております。当センターやHPCI等の国内のスーパーコンピューター環境は、この数年で劇的に進歩し、これまでにない研究成果や新展開が報告されています。本年度は、当センターを利用されている方を中心に、計算科学の最前線で活躍されている研究者を講師としてお招きし、最新の成果の報告と今後の展開についてご議論いただき、当センター利用者の皆様の研究の参考にしていただくため、「計算化学の最新の成果と展開」というテーマでワークショップを企画しました。

また、実験研究者の方々や大学院生の皆さんに幅広く参加していただけるようポスター発表も企画しました。幅広い分野からのご参加を期待しております。

### プログラム

1月21日(火)

- 13:30 - 14:00 受付
- 14:00 - 14:10 はじめに
- 14:10 - 14:50 中辻博 (量子化学研究協会研究所)  
「革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション」
- 14:50 - 15:30 中嶋隆人 (理研AICS)  
「分子科学計算ソフトウェア「NTChem」」
- 15:30 - 15:50 Break
- 15:50 - 16:30 倉重佑輝 (分子科学研究所)  
「多参照電子相関理論における最近の進展」
- 16:30 - 17:10 林重彦 (京都大学)  
「柔らかいタンパク質の分子機能の理解と設計」
- 17:10 - 18:20 ポスター発表
- 18:30 - 20:30 懇親会

1月22日(水)

- 9:30 - 10:10 袖山慶太郎 (物質・材料研究機構)  
「「京」を用いたLiイオン電池の電解液還元分解およびSEI膜生成反応の解析」
- 10:10 - 10:50 岸亮平 (大阪大学)  
「閉殻および開殻分子系の電子構造と光学応答・電子動力学の相関についての理論研究」
- 10:50 - 11:10 Break
- 11:10 - 11:50 Stephan Irle (名古屋大学)  
「Game-Changing Influence of Excited States Dynamics for Photoemission Properties of  $\pi$ -Conjugated Molecular Dyes」
- 11:50 - 12:30 河野裕彦 (東北大学)  
「分子の振動励起と化学結合ダイナミクス」
- 12:30 - 12:40 おわりに

#### • 宿泊について (三島ロッジ) :

\* ロッジ (食事の用意なし) は部屋に限りがあり、ご希望に添えない場合がございます。

\*料金は前払いのため、受付時間内にお釣りの無いようにお支払いをお願いします。到着の遅れる方はご利用いただけません。

\*チェックイン午後3時、チェックアウト午前9時

\* ホテルをご希望の方は各自でご予約をお願いします。  
下記URLをご参考ください。

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

\*支援はセンター利用者を優先となり、ご希望に添えない場合もございます。

\* 学術支援以外の旅費の支給、ロッジのご利用はご遠慮いただいております。

• 懇親会について

1月21日(火)

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)

懇親会会費 5,000円(一般)/4,000円(学生)

- ・ 予約制のため申込み後のキャンセルはご遠慮ください。
- ・ 急なキャンセルはお支払いいただく場合がございます。
- ・ お支払いは受付時間に集金します、お釣りのないようお願いします。

• 旅費・宿泊費の支援について

旅費支援希望の方は、後日、手続きのメールを送付いたします。自然科学研究機構より、1, 2か月後に口座振込となります。

\* 学生の場合は修士以上で、指導教員の許可(印)が得られる方のみ支援可能です。学部生の参加はできますが旅費支援はできません。

学生の方は、賠償付障害保険の加入が参加の条件です。

• ポスター発表

ポスターボードのサイズは、縦120cm×横90cmです。  
当日掲示されるものをお持ちください。

旅費希望の参加の申込締切日: 2014年1月6日(月) 17:00

登録はこちら 登録受付は  
終了しました。

参加申込締切日: 2014年1月13日(月) 17:00

お問い合わせ: 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  
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: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp)