

## 「第16回分子シミュレーションスクール」

### 第16回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -

本年も、9月5日(月)～9月7日(水)の3日間の日程で、「第16回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」を、分子科学研究所、計算物質科学人材育成コンソーシアム(分子科学)、分子シミュレーション学会の主催にて開催いたします。今年度は、2年ぶりに岡崎コンファレンスセンターでの開催としますが、新型コロナウイルス感染拡大の影響と過去2年におけるオンラインによる参加者の増加を考慮して、オンラインとのハイブリッド開催とします。

毎回好評を博している当スクールからは、大学や企業において分子シミュレーションを専門とされる研究者の方々を多数輩出しています。今年度も例年にも増して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)、篠田渉(岡山大学)

主催: 自然科学研究機構分子科学研究所、計算物質科学人材育成コンソーシアム(分子科学)、分子シミュレーション学会

開催日時: 2022年9月5日(月)～9月7日(水) ※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 <http://www.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

申込締切: 2022年8月3日(水)まで(現地参加形式)、8月26日(金)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。

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。

#### ■プログラム \*敬称略

第1日目: 9月5日(月)		講師	座長
9:20 - 9:30	開会の挨拶		
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	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
14:20 - 15:30	原子間・分子間相互作用エネルギー関数	三上 益弘(慶応義塾大学)	吉井
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)	森田
17:00 - 18:10	分子シミュレーションと理論化学	森田 明弘(東北大学)	奥村

第2日目: 9月6日(火)		講師	座長
9:30 - 10:40	自由エネルギー計算	松林 伸幸(大阪大学)	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(日立製作所(株))	松林
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	岡本 祐幸(名古屋大学)	高田
14:20 - 15:30	複雑分子系のメゾスコピック分子シミュレーション	高田 彰二(京都大学)	岡本
15:40 - 16:50	化学反応と分子シミュレーション - 素反応から複合反応へ、そして実在反応系へ -	長岡 正隆(名古屋大学)	篠田
17:00 - 18:10	粗視化分子モデルとその応用	篠田 渉(岡山大学)	長岡

第3日目: 9月7日(水)		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	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)	岡崎

#### ■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ください。）

\* 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 <http://www.occ.orion.ac.jp/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ください。）

\* サポート可能な方には、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ください。

\* 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。(2022.7.21)

\* サポート可能な方には、所定の手続き案内メールを差し上げます。(7月中を予定)

■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、**8月3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26日(金) 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/mss2022/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。

\* 8/31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。