

第14回公開講演会

プログラム

タイトル	次期スーパーコンピュータに向けて
日時	平成9年10月30日（木）、31日（金）
場所	分子科学研究所電子計算機センター2階大会議室

10月30日（木）

13:30-14:15	「炭素新固体結晶相の構造と電子状態」	斎藤 晋（東工大理）
14:15-14:45	「無限鎖高分子の振動解析用密度汎関数法プログラムの開発」	平田 聡（分子研理論）
14:45-15:15	「励起分子と触媒系の電子状態と化学反応」	波田 雅彦（京大工）
15:15-15:45	「新しい電子状態・化学反応理論とソフトウェアの開発」	中野 晴之（東大工）
15:45-16:00	coffee break	
16:00-16:45	「21世紀の分子計算」	柏木 浩（九工大情報工）
16:45-17:30	「有機金属反応の理論的研究」	古賀 申明（名大情報文化）
17:30-18:15	「スピン起動CI法による重原子系の電子状態計算」	藪下 聡（慶応理工）
18:30-20:30	懇親会	

10月31日（金）

9:30-10:15	「並列コンピュータの現状」 ～ HP Exemplar S/Xクラスの観点から ～	志村 和紀、守屋 暁（NKK株式会社）
10:15-11:00	「凝集系における古典・量子系動力学の計算機シミュレーション」	岡崎 進（東工大総合理工）
11:00-11:30	「並列環境におけるMO&MD計算」	相田 美砂子（国立がん研）
11:30-12:00	「大規模計算による有機金属会合体の反応性の解明」	森 聖治（東大理）
12:00-13:00	昼食	
13:00-13:45	「MDによるProtein GのUnfolding Pathwayの研究」	高橋 卓也（東大総合文化）
	「分子力学の大規模計算に望ましい資源と実際」	杉浦 淳之介（東大総合文化）
13:45-14:15	「分子および分子集合体の非摂動論的非線形感受率の計算法の開発」	中野 雅由（大阪大理）
14:15-14:45	「MRCPAの開発と計算例」	田中 皓（電通大）
14:45-15:15	「Simulation of Peptides and Proteins in Generalized Ensembles」	Ulrich Hnsmann（分子研理論）
15:15-15:45	「液体の高次非線形分光」 ～ 基準振動に基づく2次元ラマンスペクトルの理論的解析	斉藤 真司（名大理）