

## 第2回大型計算成果発表会

### 電子計算機センター 第2回大型計算成果発表会 「使用プログラムの特徴と研究成果の報告」

|    |                          |
|----|--------------------------|
| 日時 | 昭和57年2月16日（火） 9:30～12:35 |
| 場所 | 分子研 研究棟 101号室            |

## プログラム

|       |   |
|-------|---|
| 9:30  | 挨拶 センター長  |
| 9:35  | 中辻 博（京大 工）<br>分子の電子状態の理論的計算                         |
| 10:05 | 岡田 勲（東工大 総合理工学研）<br>分子動力学シミュレーションによる融解塩の輸送現象及び構造の研究 |
| 10:35 | 永瀬 茂（横浜国大 教育）<br>非経験的分子軌道法によるラジカルイオン及び反応中間体の研究      |
| 11:05 | 権平 権一郎、神原 武司（電通大 電気通信）<br>二元及び三元化合物結晶とその混晶系の電子構造    |
| 11:35 | 福井 謙一、藤本 博（京大 工）<br>化学反応の動的過程に関する理論的研究              |
| 12:05 | 梅原 秀明（北里大 薬）<br>酵素反応機構及び分子間相互作用の分子軌道法的研究            |
| 12:35 | 閉会  |