

開催日時、会場、参加費のご案内です

「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」

日時	平成 24年 1月24日(火) 13:30 ~ 25日(水)
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システムを全国の研究者に共同利用して頂いています。このスーパーコンピュータ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、生物科学といった様々な分野の研究に活用されており、実際に分子理論・物性理論・生体シミュレーションに基づく多彩な研究が行われています。

また、当センターでは例年最先端の計算分子科学とその発展を理解し新しい展開を計ることを目的としてワークショップを開催しております。今年度は特にバイオサイエンスの分野に焦点を当て、計算分子科学の観点からこの分野に対してどのようなアプローチでどのような知見が得られたのか、あるいはどのようなアプローチが考えられてどのような成果が期待できるのかといったご講演・ご討論の場を本ワークショップで提供していきたいと考えております。

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。さらに、次期導入予定のスーパーコンピュータに関する利用講習会も行う予定です。

プログラム

1月24日(火)

13:30 - 13:40	はじめに 齊藤真司(センター長)
13:40 - 14:20	木寺韶紀(横浜市大) 「タンパク質の機能的運動のマルチスケールシミュレーション」
14:20 - 15:00	野口博司(東京大) 「生体膜の粗視化シミュレーション」
15:00 - 15:20	Break
15:20 - 16:00	長谷川淳也(京都大) 「光機能的蛋白質における励起状態と分子間相互作用」
16:00 - 16:40	李秀栄(理研) 「レプリカ交換分子動力学計算による水中糖鎖の立体構造予測」
16:40 - 17:20	山口兆(大阪大) 「光合成酸素発生中心CaMn <sub>4</sub> O <sub>5</sub> クラスターの構造、電子状態および反応性に関する理論的研究」
17:20 - 18:30	ポスター発表
18:30 - 20:30	懇親会

1月25日(水)

9:00 - 9:40	中村春木(大阪大) 「蛋白質の自由エネルギー地形」
9:40 - 10:20	吉田紀生(分子研) 「RISM理論による生体分子の分子認識と化学反応へ向けた研究」
10:20 - 10:40	Break
10:40 - 11:20	吉澤一成(九州大) 「分子伝導の軌道理論：実験的検証」
11:20 - 12:00	諸熊奎治(京都大) 「複合および非複合理論による複雑分子系の化学反応のシミュレーション：バイオサイエンスへの応用」
12:00 - 13:30	昼食
13:30 - 15:00	スーパーコンピュータ利用講習会
15:00 - 15:20	Break
15:20 - 16:50	スーパーコンピュータ利用講習会
16:50 - 17:00	おわりに

**懇親会：**

1月24日（火） 自然科学研究機構 職員会館  
懇親会会費 5,000円(一般)/4,000円(学生)

- **ポスター発表：**  
ポスターボードのサイズは、縦120cm×横90cmです。
- **宿泊について（三島ロッジ）：**
  - \* ロッジ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。
  - \* 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>
- **旅費・宿泊費のサポートについて：**
  - \* 学生の場合は修士以上で、指導教員の許可（印）が得られる方のみサポート可能です。
  - \* 旅費・宿泊費をサポートするには、銀行口座登録が必要となりますので、ワークショップ事務局(e-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp))までご連絡ください。
  - \* ワークショップ前後の他の出張等がある場合は、その日程・場所・旅費・日当の支給の有無をお知らせ下さい。
  - \* 旅費割り当ては、センター利用グループを優先させていただきます。
  - \* ご希望に添えない場合もありますのでご了承ください。

\* 学術支援以外の旅費の支給はご遠慮いただいております。

\* 学生の方は、賠償付障害保険の加入が参加の条件です。

---

**旅費希望の参加の申込締切日： 2011年12月31日（土） 12：00 終了しました。**

**参加およびポスター発表の申込締切日： 2012年1月14日（土） 17：00 終了しました。**

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)