

「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」

開催日 2019年 1月16日(水)～17日(木)  
 会場 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター  
<http://www.orion.ac.jp/occ/>  
 参加費 無料

当計算科学研究センターでは、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。当センター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います。また、当センターでは例年、理論・計算分子科学に関するワークショップを開催してきております。

今年度は、「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」というテーマで分子・物性科学や生物科学などの広範な分野における様々な研究対象に精力的に取り組んでおられる研究者の方を講師にお招きし、今後取り組むべき問題と必要とされる方法論やこれからの可能性について、理論及び計算科学の視点から広く展望し、ご議論いただくためのワークショップを企画しました。さらに、昨年同様、実験研究者の方々や大学院生の皆さんにも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。

参加希望者は下記参加登録申し込みページより必要事項をご記入の上、お申し込みください。ただし旅費をご希望の方は、事務手続きの都合上、2018年12月25日（火）までにお申し込みください。

プログラム \*敬称略

初日 2019年1月16日（水）

12:45-13:30	受付	
13:30-13:40	初めに 所長挨拶	
13:40-14:20	岡崎圭一（分子科学研究所）	「遷移パスサンプリングによる膜輸送タンパク質の基質輸送メカニズムの解明」
14:20-15:00	森下徹也（産業技術総合研究所）	「非平衡バスアンサンブルを用いた対数平均カダイナミクス」
15:20-16:00	鷹野 優（広島市立大学）	「計算科学による金属蛋白質活性中心の電子構造制御に関する研究 - ヘムの構造歪みに関する構造機能相関 - 」
16:00-16:40	奥村久士（生命創成探究センター）	「アミロイドβペプチドのオリゴマーとアミロイド線維の分子動力学シミュレーション」
16:40-17:50	ポスター発表	
18:00-19:30	懇親会	

二日目 2019年1月17日（木）

9:30-10:10	中井浩巳（早稲田大学）	「大規模化学反応シミュレーションプログラムDCDFTBMDの開発と応用」
10:10-10:50	森川良忠（大阪大学）	「電子状態計算による酸化物中の酸素拡散機構と金属表面上でのNO解離反応機構に関する研究」
11:10-11:50	尾形修司（名古屋工業大学）	「大規模なハイブリッド量子古典シミュレーションによるエポキシ系接着剤の性能低下機構の解明」
11:50-12:30	長岡正隆（名古屋大学）	「計算分子技術Red Moon法によるコンピュータ科学」
12:30-12:40	終わりに	

懇親会

日時 1月16日（水） 18:00～19:30

会場 岡崎コンファレンスセンター 中会議室

会費 4,000円(一般) / 3,000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、不参加でも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。

■ 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

- ・三島ロッジに宿泊を希望される方は参加登録の際に申し込んで下さい(1泊2500円)。但しロッジは数に限りがあり、希望に添えない場合もございます。

<http://www.occ.orion.ac.jp/lodge/>

- ・ホテルはご自身で予約をお願い致します。  
近郊のホテル案内は下記URLをご参考ください。

<http://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

■ 旅費・宿泊費の支援について

- ・支援はセンター利用者優先で、ご希望に添えない場合もありますのでご了承ください。  
\*民間企業の方への旅費支援、及びロッジのご利用はご遠慮いただいております。
- ・学生の場合は修士以上で、指導教官の許可(印)が得られる方のみ支援可能です。  
\*学部生の参加は可能ですが旅費の支援はできません。  
\*学生の方は賠償付傷害保険の加入が参加条件となります。
- ・自然科学研究機構の旅費規程に基づき、所属機関からの往復交通費、日当及び宿泊費を支給します。  
\*前後に別用務で他機関にご出張される場合(発着地が所属機関ではない場合)はこの限りではありませんのでその旨を事前にお知らせ願います。  
\*飛行機をご利用の場合は搭乗券、領収書の提出が必要です。  
開催日と間隔のあく搭乗日の場合、支援の対象外となる場合があります。特別な事情のある方は事前にご連絡をお願いします。
- ・登録口座への振込はワークショップ終了後、1~2ヶ月後となります。

参加(旅費支援あり) 申込締切日：2018年12月25日(火)

参加(旅費支援なし) およびポスター発表の申込み締切日：2019年1月7日(月)

**参加登録は下記からお願いします**

<https://registration.ims.ac.jp/scws2018/registration>

\*2018年12月26日~27日にかけて、上記参加登録サイトにアクセスできない状況がありましたが、現在は復旧しております。

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

Email : scws2018\_at\_ims.ac.jp

\*メールアドレス内の\_at\_は@に直してお送りください。

\*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。無断転載等はお断りいたします。