

## 第2回分子シミュレーションスクール ～基礎から応用まで～

- 主催：分子科学研究所
- 会場：岡崎コンファレンスセンター 小会議室 (<http://www.orion.ac.jp/occ/>)
- 会期：2007年12月18日(火) ～ 12月21日(金)
- 参加費：無料
- 懇親会：12月19日(水) 18:30 ～

## 開催プログラム

12月18日(火)

|             |                      |                 |
|-------------|----------------------|-----------------|
| 9:30-10:00  | 受付                   |                 |
| 10:00-13:00 | 開会式                  |                 |
| 10:30-12:00 | 樋渡 保秋 先生 (金沢大学)      | 分子シミュレーション入門I   |
| 13:20-14:50 | 樋渡 保秋 先生 (金沢大学)      | 分子シミュレーション入門II  |
| 14:50-16:20 | 上田 顕 先生 (京都大学)       | 分子シミュレーションの基礎I  |
| 16:20-17:50 | 上田 顕 先生 (京都大学)       | 分子シミュレーションの基礎II |
| 19:30-21:00 | 三上 益弘 先生 (産業技術総合研究所) | 分子シミュレーションの技法   |

12月19日(水)

|             |                      |                             |
|-------------|----------------------|-----------------------------|
| 9:00-10:30  | 三上 益弘 先生 (産業技術総合研究所) | 原子間・分子間相互作用エネルギー関数          |
| 10:30-12:00 | 田中 秀樹 先生 (岡山大学)      | 水のMDシミュレーション                |
| 13:20-14:50 | 木寺 詔紀 先生 (横浜市立大学)    | 分子動力学法を用いたシミュレーション研究:タンパク質系 |
| 14:50-16:20 | 岡本 祐幸 先生 (名古屋大学)     | 蛋白質系の拡張アンサンブルシミュレーションI      |
| 16:20-17:50 | 岡本 祐幸 先生 (名古屋大学)     | 蛋白質系の拡張アンサンブルシミュレーションII     |
| 18:30-21:00 | 懇親会                  |                             |

12月20日(木)

|             |                   |                              |
|-------------|-------------------|------------------------------|
| 9:00-10:30  | 甲賀 研一郎 先生 (岡山大学)  | 不均一系の分子シミュレーション              |
| 10:30-12:00 | 河村 雄行 先生 (東京工業大学) | 分子シミュレーションの応用:地球・環境・無機材料物質など |
| 13:20-14:50 | 岡崎 進 先生 (分子科学研究所) | 自由エネルギー計算I                   |
| 14:50-16:20 | 岡崎 進 先生 (分子科学研究所) | 自由エネルギー計算II                  |
| 19:00-21:00 | ディスカッション          | 魅力ある分子シミュレーション研究             |

12月21日(金)

|             |                 |                            |
|-------------|-----------------|----------------------------|
| 9:00-10:30  | 三浦 伸一 先生 (金沢大学) | 量子シミュレーション法                |
| 10:30-12:00 | 山本 量一 先生 (京都大学) | 非平衡分子動力学シミュレーションI          |
| 13:20-14:50 | 山本 量一 先生 (京都大学) | 非平衡分子動力学シミュレーションII         |
| 14:50-16:20 | 高橋 英明 先生 (大阪大学) | 量子化学と統計力学による凝縮系の分子シミュレーション |

開催時の写真

こちらをご覧ください。 <http://ccinfo2013.ims.ac.jp/msschool/photo2007.html>