

## 「第15回分子シミュレーションスクール」

### 第15回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -

2021年9月7日から9日までの日程で、自然科学研究機構 分子科学研究所、計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）、分子シミュレーション学会主催「分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—」を開催いたします。今年度は、新型コロナウイルス感染拡大の影響を鑑み、オンライン開催となります。講義は学部卒業程度の知識があれば理解できるような内容となっており、特にシミュレーションの経験や専門知識は前提としていません。これから分子シミュレーションを始めようとしておられる学部学生や大学院生、または実験家や企業の研究者など、計算科学に興味がある方々のご参加をお待ちしております。

世話人: 名古屋大学 篠田 渉、分子科学研究所 岡崎 圭一

主催: 自然科学研究機構分子科学研究所、計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）、分子シミュレーション学会

開催日時: 2021年9月7日（火）～9月9日（木）

開催方法: Zoomによるオンライン開催

参加費: 無料

申込締切: 2021年8月31日（火）

#### ■プログラム \*敬称略

| 第1日目: 9月7日（火） |   | 講師                 | 座長 |
|---------------|---|--------------------|----|
| 9:20 - 9:30   | 開会の挨拶   | 岡崎 進 (東京大学)        |    |
| 9:30 - 10:40  | 分子シミュレーションの全体像・概論                             | 松本 充弘 (京都大学)       | 甲賀 |
| 10:50 - 12:00 | 統計力学  | 甲賀 研一郎 (岡山大学)      | 松本 |
| 12:00 - 13:00 | 昼食  |                    |    |
| 13:00 - 14:10 | 力学、解析力学、数値解法、拘束動力学                            | 吉井 範行 (信越化学工業(株))  | 三上 |
| 14:20 - 15:30 | 各種統計アンサンブルの生成法                                | 奥村 久士 (生命創成探究センター) | 吉井 |
| 15:40 - 16:50 | 原子間・分子間相互作用エネルギー関数                            | 三上 益弘 (慶応義塾大学)     | 奥村 |
| 第2日目: 9月8日（水） |   | 講師                 | 座長 |
| 9:30 - 10:40  | 分子シミュレーションと理論化学                               | 森田 明弘 (東北大学)       | 高田 |
| 10:50 - 12:00 | 実験計測と分子シミュレーションの融合                            | 高田 彰二 (京都大学)       | 森田 |
| 12:00 - 13:00 | 昼食  |                    |    |
| 13:00 - 14:10 | 自由エネルギー計算                                     | 松林 伸幸 (大阪大学)       | 篠田 |
| 14:20 - 15:30 | 高分子材料設計における分子シミュレーション                         | 川上 智教 (東レ(株)医薬研究所) | 松林 |
| 15:40 - 16:50 | 粗視化分子モデルとその応用                                 | 篠田 渉 (名古屋大学)       | 川上 |
| 第3日目: 9月9日（木） |   | 講師                 | 座長 |
| 9:30 - 10:40  | 化学反応と分子シミュレーション<br>-気相分子の素反応から分子凝集状態の複合化学反応へ- | 長岡 正隆 (名古屋大学)      | 岡崎 |
| 10:50 - 12:00 | 分子シミュレーションと反応速度論・マルコフモデル                      | 岡崎 圭一 (分子科学研究所)    | 長岡 |

#### ■参加登録

参加ご希望の方は、**8月31日（火）正午**までに下記からご登録ください。

\*申し込みを締め切りました。多数の登録ありがとうございました。

<https://registration.ims.ac.jp/mss2021/registration>

ご登録時に登録確認メールを自動送信します。メールが届かない場合は、下記問い合わせ先へご連絡ください。

後日スクール参加のための必要情報（Zoom ID、PW、テキスト情報等）がメールにて配信されます。

\*9/3に開催情報及び講義テキストに関するメールを参加登録者に2通送信しました。

メールが届いていない場合は、スクール事務局school@draco.ims.ac.jpへメールでご連絡下さい。

(特に登録アドレスがgmailの場合は届かない場合があります。)

■分子シミュレーションスクールおよびホームページに関する 問い合わせ先

自然科学研究機構 分子科学研究所  
分子シミュレーションスクール事務局

〒444-8585 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: school\_at\_draco.ims.ac.jp

※メールアドレス内の「\_at\_」は「@」に直してお送り下さい。

\*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。  
無断転載等は一切お断りいたします。