

## 第14回公開講演会

### プログラム

タイトル	次期スーパーコンピュータに向けて
日時	平成9年10月30日(木)、31日(金)
場所	分子科学研究所電子計算機センター2階大会議室

10月30日(木)

13:30-14:15	「炭素新固体結晶相の構造と電子状態」	斎藤 晋 (東工大理)
14:15-14:45	「無限鎖高分子の振動解析用密度汎関数法プログラムの開発」	平田 聡 (分子研理論)
14:45-15:15	「励起分子と触媒系の電子状態と化学反応」	波田 雅彦 (京大工)
15:15-15:45	「新しい電子状態・化学反応理論とソフトウェアの開発」	中野 晴之 (東大工)
15:45-16:00	<b>coffee break</b>	
16:00-16:45	「21世紀の分子計算」	柏木 浩 (九工大情報工)
16:45-17:30	「有機金属反応の理論的研究」	古賀 申明 (名大情報文化)
17:30-18:15	「スピン起動CI法による重原子系の電子状態計算」	藪下 聡 (慶応理工)
18:30-20:30	<b>懇親会</b>	

10月31日(金)

9:30-10:15	「並列コンピュータの現状」 ～ HP Exemplar S/Xクラスの観点から ～	志村 和紀、守屋 暁 (NKK株式会社)
10:15-11:00	「凝集系における古典・量子系動力学の計算機シミュレーション」	岡崎 進 (東工大総合理工)
11:00-11:30	「並列環境におけるMO&MD計算」	相田 美砂子 (国立がん研)
11:30-12:00	「大規模計算による有機金属会合体の反応性の解明」	森 聖治 (東大理)
12:00-13:00	<b>昼食</b>	
13:00-13:45	「MDによるProtein GのUnfolding Pathwayの研究」	高橋 卓也 (東大総合文化)
	「分子動力学の大規模計算に望ましい資源と実際」	杉浦 淳之介 (東大総合文化)
13:45-14:15	「分子および分子集合体の非摂動論的非線形感受率の計算法の開発」	中野 雅由 (大阪大理)
14:15-14:45	「MRCPAの開発と計算例」	田中 皓 (電通大)
14:45-15:15	「Simulation of Peptides and Proteins in Generalized Ensembles」	Ulrich Hnsmann (分子研理論)
15:15-15:45	「液体の高次非線形分光」 ～ 基準振動に基づく2次元ラマンスペクトルの理論的解析	斉藤 真司 (名大理)