

## 第2回大型計算成果発表会

### 電子計算機センター 第2回大型計算成果発表会 「使用プログラムの特徴と研究成果の報告」

日時	昭和57年2月16日（火） 9:30～12:35
場所	分子研 研究棟 101号室

## プログラム

9:30	挨拶 センター長
9:35	中辻 博（京大 工） 分子の電子状態の理論的計算
10:05	岡田 勲（東工大 総合理工学研） 分子動力学シミュレーションによる融解塩の輸送現象及び構造の研究
10:35	永瀬 茂（横浜国大 教育） 非経験的分子軌道法によるラジカルイオン及び反応中間体の研究
11:05	権平 権一郎、神原 武司（電通大 電気通信） 二元及び三元化合物結晶とその混晶系の電子構造
11:35	福井 謙一、藤本 博（京大 工） 化学反応の動的過程に関する理論的研究
12:05	梅原 秀明（北里大 薬） 酵素反応機構及び分子間相互作用の分子軌道法的研究
12:35	閉会