

## 「分子科学プログラムライブラリの充実に向けて」

日時	平成 23年 1月24日(月) 13:30 ~ 25日(火) 16:40
会場	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
参加費	無料

- プログラム (ポスター発表を含む)

計算科学研究センターでは、開設以来、プログラムライブラリの収集と開発、整備に努めていますが、今後その一層の充実と強化に努め、国内外の研究者に提供することが、計算基盤研究センターとしての大きな役割の一つであると考えています。そのため、センター独自の開発だけでなく、プログラム開発を行っているセンター利用者とも共同で、ライブラリの開発、整備を行いたいと考えています。今回は、オリジナルの理論・プログラムで研究をなされている先生方にご講演いただきます。こうした研究者の独創的な研究成果を、実用的なプログラムライブラリという形で国内外に発信することは、計算科学コミュニティにとって今後ますます重要になります。そうした活動を、当センターも積極的にサポートする姿勢を示すため、本ワークショップを企画いたしました。また、実験研究者の方々や大学院生の皆さんに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。

幅広い分野からのご参加を期待しております。

## プログラム

1月24日(月)

13:30 - 13:40	はじめに 平田文男(センター長)
13:40 - 14:20	奥村久士(計算センター)、水谷文保(計算センター) 「IMSライブラリ構想」
14:20 - 15:00	中井浩巳(早稲田大) 「電子状態理論の理論開発とプログラム公開：分割統治(DC)法のGAMESS実装を例に」
15:00 - 15:20	Break
15:20 - 16:00	塚田捷(東北大) 「表面・界面・ナノ構造の理論と計算科学のアプローチ」
16:00 - 16:40	信定克幸(分子研) 「ナノ構造体における電子・電磁場ダイナミクスの大規模並列化計算」
16:40 - 17:20	南部伸孝(上智大) 「インドリルマレイミド誘導体による蛍光標識タグ分子の理論的解析」
17:20 - 18:30	ポスター発表
18:30 - 20:30	懇親会

1月25日(火)

9:00 - 9:40	斉藤真司(分子研) 「多時間相関関数を用いた凝縮系反応ダイナミクスの理論研究」
9:40 - 10:20	Arend G. Dijkstra(京都大) "Excitation dynamics in a complex environment: hierarchy of equations of motion"
10:20 - 10:40	Break
10:40 - 11:20	奥村光隆(大阪大) 「凝縮重多電子系の電子状態の量子化学計算」
11:20 - 12:00	武次徹也(北海道大) 「非断熱効果とトンネル効果を実装したab initioダイナミクスの展開」
12:00 - 13:30	昼食
13:30 - 14:10	岡本祐幸(名古屋大) 「レプリカ交換法プログラム：REM」
14:10 - 14:50	岡崎進(名古屋大) 「全原子分子動力学計算によるミセル、脂質膜系の構造と動力学」
14:50 - 15:10	Break

15:10 - 15:50	横川大輔（大阪大） 「溶液の理論化学：積分方程式理論に基づいた手法の開発と応用」
15:50 - 16:30	中辻博（量子化学研究協会） 「予言的量子化学の基礎とSAC-CI科学の展開」
16:30 - 16:40	おわりに

**懇親会：**

1月24日（月） 岡崎コンファレンスセンター 中会議室  
懇親会会費 5,000円(一般)/4,000円(学生)

- **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）：**  
今回は、三島ロッジ改装中の為ご利用頂けません。下記URLをご参考に各自で宿泊手配をおねがいします。  
<http://www.ims.ac.jp/location/hotel.html>
- **旅費・宿泊費のサポートについて：**
  - \* 学生の場合は修士以上で、指導教員の許可（印）が得られる方のみサポート可能です。
  - \* 旅費・宿泊費をサポートするには、銀行口座登録が必要となりますので、ワークショップ事務局(e-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp))までご連絡ください。
  - \* ワークショップ前後の他の出張等がある場合は、その日程・場所・旅費・日当の支給の有無をお知らせ下さい。
  - \* 旅費割り当ては、センター利用グループを優先させていただきます。
  - \* ご希望に添えない場合もありますのでご了承ください。

\* 学術支援以外の旅費の支給はご遠慮いただいております。

\* 学生の方は、賠償付障害保険の加入が参加の条件です。

参加登録はこちらです

**旅費希望の参加の申込締切日：** 2010年12月28日 12:00 (火)

**参加およびポスター発表の申込締切日：** 2011年1月14日 (金)

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

E-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp)

添付	サイズ
<a href="#">2011WS.pdf</a>	519.49 KB