

文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築」
H P C I 戦略分野 2 「新物質・エネルギー創成」
計算物質科学イニシアティブ (CMS I)
計算分子科学研究拠点 第 2 回実験化学との交流シンポジウム

主催：分子科学研究所計算分子科学研究拠点

日時：2012 年 11 月 16 日 (金) 13:30-18:55 及び懇親会
2012 年 11 月 17 日 (土) 9:30-17:15

場所：京都大学福井謙一記念研究センター

〒606-8103 京都市左京区高野西開町 3 4 - 4

アクセス：<http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/access/access.html>

参加費：無料 (但し、懇親会費：5 0 0 0 円)

懇親会会場：ホテルアバンシェル京都 (旧ホリディ・イン京都)

所在地：〒606-8103 京都府京都市左京区高野西開町 3 6

アクセス：<http://www.solarehotels.com/collection/hotel-avanshell-kyoto/map/detail.html>

参加登録：以下のホームページより「第 2 回実験化学との交流シンポジウム」を選んで登録をお願い致します。

<http://tcci.ims.ac.jp/tcci/index.html>

☆参加登録締切：2012 年 11 月 2 日(金)

お問い合わせ先：〒444-8585 岡崎市明大寺町西郷中 38

分子科学研究所計算分子科学研究拠点事務局

電話：0564-55-7074 (発信音の後) 5 2 石谷

FAX：0564-54-2254(代表),0564-55-7074 (発信音の後) 5 3

E-mail:tcci-office@yfep2.ims.ac.jp

※アドレス中の「@」は、半角にしてお送り下さい。

講演プログラム

第 1 日目：2012 年 11 月 16 日 (金) 13:30~18:55

☆セッション 1

13:30-13:40 (分子研/東大院総合文化) 高塚和夫開会の辞、拠点報告

13:40-14:05 (岡山大院自然科学) 田中 秀樹 TCCI 報告 1

「ハイドレートの多形と安定限界」

14:05-14:55 (慶大理工) 大村 亮招待講演 1

「クラスレートハイドレートの結晶構造と熱物性：

実験からわかること計算からわかること」

14:55-15:45 (東大先端研) 瀬川 浩司 招待講演 2

「有機系太陽電池の高効率化に向けて」

15:45-16:35 (京大院理) 鈴木 俊法 招待講演 3

「超高速光電子分光による気相および液相の非断熱化学ダイナミクスの研究」

16:35-16:50 休憩

☆セッション2

- 16:50-17:15 (名大院工) 岡崎 進 TCCI 報告2
「ポリオウイルスカプシドの分子動力学計算」
- 17:15-18:05 (微生物化研) 野本 明男 招待講演4
「ポリオウイルス感染と生体分子 (仮題)」
- 18:05-18:55 (北大院薬) 原島 秀吉 招待講演5
「多機能性エンベロープ型ナノ構造体の創製とナノ医療への展開」
- 18:55-19:10 休憩・移動
- 19:10-20:40 懇親会@ホテルアバンシエル京都

第2日目：2012年11月17日(土) 9:30~17:15

☆セッション3

- 9:30-9:55 (東大院工) 山下 晃一 TCCI 報告3
「相界面における電荷移動状態と太陽光エネルギー変換」
- 9:55-10:20 (分子研) 信定 克幸 TCCI 報告4
- 10:20-11:10 (広島大院理) 山本 陽介 招待講演6
「高配位および低配位典型元素の実験研究と計算化学」
- 11:10-12:00 (名大院理) 阿波賀 邦夫 招待講演7
「固液界面の電子移動に起因する新しい物性化学」
- 12:00-13:30 昼食・休憩

☆セッション4

- 13:30-13:55 (京大福井センター) 永瀬 茂 TCCI 報告5
「高周期元素の結合と構造」
- 13:55-14:45 (京大 iCeMS) 北川 進 招待講演8
「多孔性金属錯体によるメゾスコピック配位空間の化学」
- 14:45-15:35 (東大院理) 中村 栄一 招待講演9
「電子顕微鏡による単分子・実時間イメージング (SMRT-TEM)で拓く新科学」
- 15:35-15:50 休憩・移動

☆セッション5

- 15:50-16:15 (分子研) 江原 正博 TCCI 報告6
「光物性化学と微粒子触媒における実験との協力研究」
- 16:15-17:05 (京大院工) 安部 武志 招待講演10
「蓄電池用電極/電解質界面での電荷移動反応ーリチウムイオン電池を中心にー」
- 17:05-17:15 (京大福井センター) 榎 茂好 まとめ、閉会の辞

※講演プログラムは、予告なく変更される可能性があります。予めご了承の程よろしくお願ひ致します。