

# 量子論と古典論が綴るシミュレーションの世界

**主催** 近畿化学協会コンピュータ化学部会

**協賛** 近畿化学協会、日本化学会近畿支部、日本薬学会近畿支部  
有機合成化学協会関西支部、理化学研究所計算科学研究機構(予定)

**日時** 平成26年 6月 9日(月)13:15~17:30

**会場** (独)理化学研究所 計算科学研究機構 1階セミナー室

(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26、代表電話 078-940-5555)

〈交通〉ポートライナー「三宮駅」からはポートライナー神戸空港行に乗車、「京コンピュータ前駅」下車、改札を出て右に曲がり、右手にあるエスカレーターで降りて直進すると左前方の建物。徒歩3分。

## プログラム

### 講演

1. 分子凝集状態の化学現象の取り扱い:QM/MM法から分子技術へ (13:15~14:15)

名古屋大学大学院情報科学研究科物質情報論講座 教授 長岡 正隆氏

2. 蛋白質中における金属補因子の電子構造制御—QM法、QM/MM法による解析—

(14:15~15:15)

大阪大学蛋白質研究所附属蛋白質解析先端研究センター 助教 鷹野 優氏

3. FMO法の応用、電子と核の波束シミュレーション、QM/MM法への所見 (15:25~16:25)

京都大学大学院理学研究科化学専攻 准教授 安藤 耕司氏

**見学** (16:30~17:30)

「京コンピュータ」見学・概要説明

**ミキサー懇親会** (17:45~18:45) 於：同所1階レストラン「FOCUS」

※講師の先生を囲みアフターディスカッションを兼ねた簡易な懇親会を開催致します。

**参加費** 近畿化学協会コンピュータ化学部会会員・近畿化学協会学識会員(大学・公設機関所属):無料、近畿化学協会法人会員・協賛団体所属会員:5,000円、会員外:10,000円(何れもテキスト代含む)、ミキサー懇親会:2,000円

**申込方法** 下記申込書または用紙に必要事項を明記し、FAXまたはE-mailにてお申し込み下さい。参加費は当日会場にてお支払い下さい。参加決定者には5月下旬に参加証を送付します。

**申込締切** 定員(30名)になり次第締切

**申込先** 一般社団法人 近畿化学協会コンピュータ化学部会

〒550-0004 大阪市西区靱本町1-8-4 大阪科学技術センター6階

電話:06-6441-5531、FAX:06-6443-6685、E-mail:sanada@kinka.or.jp

## 近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会(第90回例会)参加申込書(平成26年度)

氏名		会員資格	<input type="checkbox"/> コンピュータ化学部会員・近化学識会員 <input type="checkbox"/> 近化法人会員 <input type="checkbox"/> 会員外 <input type="checkbox"/> 協賛団体会員(所属: )
勤務先		所属	
所在地	〒 TEL E-mail		
ミキサー	( ) 参加 / ( ) 不参加	参加費	_____ 円