



研究者各位

幹事 榊 茂好、永瀬 茂

平素お世話になっております。

TCCIでは、下記のように、実験化学と計算化学の交流のためのシンポジウムを開催します。最先端の研究を行うためには、現在、実験と計算が互いの強みを活かして協力していくことが強く求められております。今回、

分子科学分野から見て魅力的な課題について実験研究を活発に推進されている研究者の方々にご講演を頂き、研究交流を活発化させるためのシンポジウムを企画しました。

つきましては、研究者の皆様には是非ご出席を賜りたく、ここにご案内をお送りします。また、11月10日(木)の夜には懇親会を予定しておりますので、こちらにも、是非、ご出席の程よろしくお願い致します。

また、このシンポジウムに前後しまして、CMSI元素戦略WG実験・計算連携検討会「電池材料の部」[11月9日(水)@東大本郷小柴ホール]、「触媒の部」[11月12日(土)@京大福井謙一記念研究センター]も開催致します。併せてご出席の程よろしくお願い致します。

記

主催：分子科学研究所 計算分子科学研究拠点

協賛：次世代ナノ統合シミュレーションの研究開発

日時：2011年11月10日(木) 13:30 ~ 18:15 及び 懇親会

2011年11月11日(金) 9:00 ~ 17:05

場所：京都大学 福井謙一記念研究センター

所在地：〒606-8103 京都市左京区高野西開町3-4-4

アクセスにつきましては、以下のPDFをご覧ください。

<http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/publication/PamphletJpn2010.pdf>

参加費：無料(但し、懇親会費：5000円)

懇親会：ホテル アバンシェル京都

所在地：〒606-8103 京都府京都市左京区高野西開町3-6

<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お願い致します。

<http://tcci.ims.ac.jp/tcci/event/workshop5.html>

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) 52 石谷、51 嶋田

FAX：0564-55-7074(発信音の後) 53

E-mail: tcci-office@yfe2.ims.ac.jp

※アドレス中の「@」は、半角にしてお送り下さい。

ご参考：CMSI元素戦略WG実験・計算連携検討会「電池材料の部」

[11月9日(水)@東大本郷小柴ホール]

http://www.cms-initiative.jp/ja/events/cmsi-wg/111109wg_denchi

CMSI元素戦略WG実験・計算連携検討会「触媒の部」

[11月12日(土)@京大福井謙一記念研究センター]

http://www.cms-initiative.jp/ja/events/cmsi-wg/111112wg_shokubai

講演プログラム

第1日目 2011年11月10日(木) 13:30 ~ 18:15

座長：(京大/分子研) 榊 茂好 ご挨拶

13:30 - 13:45 (分子研/東大院総合文化) 高塚 和夫 開会の辞・拠点報告

13:45 - 13:50 (文科省研究振興局情報課計算科学技術推進室長補佐) 村松 哲行 ご挨拶

13:50 - 13:55 (理研計算科学研究機構) 平尾 公彦 ご挨拶

13:55 - 14:25 (分子研)	セッション1：分子物性／超分子・大規模機能分子 第2部会特別支援課題「ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発」の紹介
14:25 - 15:10 (東北大院理)	山下 正廣 「招待講演：単分子量子磁石を用いた量子分子スピントロニクス」
15:10 - 15:55 (東大院理)	西原 寛 「招待講演：光・電子機能錯体の創製と界面複合」

15:55 - 16:15 休憩

座長：(東北大院理) 森田 明弘	セッション2：物理化学
16:15 - 16:45 (神戸大院システム情報)	天能 精一郎 第1部会研究課題「新量子相・新物質の基礎科学」の紹介
16:45 - 17:30 (理研基幹研)	田原 太平 「招待講演：先端的分光研究と計算分子科学への期待」
17:30 - 18:15 (京大院理)	寺嶋 正秀 「招待講演：生体分子反応を理解するために」

18:15 - 18:25 休憩・移動

18:25 - 20:25 懇親会 @ホテル アバンシエル京都

第2日目 2011年11月11日(金) 9:00 ~ 17:05

座長：(早大先進理工) 中井 浩巳	セッション3：エネルギー関係／有機化学・化学反応
9:00 - 9:30 (東大院工)	山下 晃一 第4部会研究課題「エネルギー変換」の紹介
9:30 - 10:15 (京大院理)	大須賀 篤弘 「招待講演：環拡張ポルフィリンから生成する新しい電子系-メビウス芳香族性と安定ピラジカル」
10:15 - 11:00 (東大院工)	山田 淳夫 「招待講演：リチウムイオン電池電極材料の基礎科学と応用展開」
11:00 - 11:45 (京大院工)	今堀 博 「招待講演：自己組織化と光電荷分離・電荷輸送機能発現」

11:45 - 13:15 昼食・休憩

座長：(分子研) 永瀬 茂	セッション4：物性科学／材料科学
13:15 - 14:00 (東大院理)	常行 真司 「招待講演：ペロフスカイト型酸化物における不純物水素の荷電状態とダイナミクス」
14:00 - 14:45 (京大院工)	田中 功 「招待講演：マテリアルズ・インフォマティクスの創出と新材料機能の探索」

14:45 - 15:00 休憩

座長：(分子研) 齊藤 真司	セッション5：生命科学
15:00 - 15:30 (名大院工)	岡崎 進 第3部会研究課題「分子機能と物質変換」の紹介
15:30 - 16:15 (中部大生命)	鈴木 康夫 「招待講演：インフルエンザ創薬における実験科学と高精度計算科学との融合の重要性」
16:15 - 17:00 (分子研)	加藤 晃一 「招待講演：第3の生命鎖=糖鎖の分子科学(仮題)」
17:00 - 17:05 (分子研)	高塚 和夫 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い致します。