

---

# 若手研究会：化学反応のエネルギー曲面とダイナミクス

---

会期：2009年8月8日（土）  
会場：京都大学 理学部 化学教室  
理学部6号館 204号室  
（京都府京都市左京区北白川追分町）

---

## ～プログラム～

- 13:30 - 13:40 Opening Remarks  
13:40 - 14:10 藤本和宏（京都大）  
「キサントロドブシンの励起エネルギー移動：  
遷移電子密度を用いた擬クーロン相互作用の計算法の開発」
- 14:10 - 14:40 井内哲（京都大）  
「システマティックな二体ポテンシャルへの分割から見た水中における多体電子分極効果」
- 14:40 - 14:50 Coffee Break  
14:50 - 15:20 東雅大（分子研）  
「酵素反応の定量的理解を目指して：  
Electrostatically Embedded Multi-Configuration Molecular Mechanics」
- 15:20 - 15:50 岡崎圭一（早稲田大）  
「粗視化シミュレーションによるタンパク質の構造変化と  
リガンド結合の共役メカニズムの考察」
- 15:50 - 16:00 Coffee Break  
16:00 - 16:30 米原文博（東京大）  
「短パルスレーザーに誘起される電子励起動力学と非断熱反応動力学」
- 16:30 - 17:00 中村和磨（東京大）  
「第一原理からの物質の低エネルギー有効モデル構築」
- 17:00 - 17:10 Closing Remarks
- 

## 世話人

吉田紀生(分子研)  
佐藤啓文(京都大学)  
中野晴之(九州大学)  
安藤耕司(京都大学)  
山本武志(京都大学)  
林 重彦(京都大学)

## 問い合わせ先

〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町西郷中3 8  
自然科学研究機構 分子科学研究所 分子基礎理論第2  
吉田紀生

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

Tel: 0564-55-7257 Fax: 0564-53-4660