

## The Second French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry 2009

**主催** The Second French-Japanese Workshop 実行委員会  
**協賛** 日本化学会情報化学部会、日本コンピュータ化学会  
**会期** 11月28日(土) 10時~18時  
**会場** 西宮市大学交流センター (西宮市北口町1番2号 ACTA 西宮東館6階)  
詳細は <http://www.ph.tokushima-u.ac.jp/article/0015900.html> をご覧ください。

### 講演

#### [Chemoinformatics]

1. Recent Advances in Structure-Property Modeling and Virtual Screening (University of Strasbourg, France) Alexandre Varnek
2. (Nara Institute of Science and Technology, Japan) Shigehiko Kanaya
3. Inductive Logic Programming and Its Application to Drug Discovery (Astellas Pharma Inc., Japan) Kazuhisa Tsunoyama

#### [Molecular Dynamics]

4. Ab Initio FMO-MD Simulations of Chemical Reactions in Explicit Solvent (AIST, Japan) Yuto Komeiji
5. Coarse-Grained Molecular Dynamics Study of Lipid Membranes (AIST, Japan) Wataru Shinoda
6. Experiment Integrated Multiscale Computational Chemistry for Design of Functional Materials (Tohoku University, Japan) Hiromitsu Takaba

#### [Quantum Chemistry]

7. Parity Violation in Molecules (CNRS, France) Trond Saue
8. Nuclear Quantum Effect on Hydrogen Bonded Systems (Yokohama City University, Japan) Masanori Tachikawa
9. (Mitsubishi Chemical Corporation, Japan) Shinichiro Nakamura
10. A QM/MC/FEP Study on Solvent Effects for Chemical Reactions (Yamaguchi University, Japan) Toru Yamaguchi
11. QM/MM Study on the Structure and Reactivity of Oxygenation Enzymes (Kyushu University, Japan) Kazunari Yoshizawa

[ポスター発表] 16時30分~18時

**発表申込方法** 依頼講演のみで一般の口頭発表は行いません。ポスター発表希望者は、下記申込先までご連絡下さい。

**参加申込方法** 参加登録予約はありません。当日に受付いたします。

**懇親会** 11月28日(土) 19時より 会場未定 会費~5000円

**申込先・問合せ先** 徳島大学大学院ヘルスバイオサイエンス (HBS) 研究部 創薬理論化学研究室 中馬寛 TEL (088) 633-7257 FAX (088) 633-9508 E-mail:

hchuman@ph.tokushima-u.ac.jp