

## 平成 23 年度 最先端理工学実験 (CAD 分野) 受講者の募集について

# 受講学生募集 (対象大学院生)

名古屋大学大学院工学研究科

「最先端理工学実験 (CAD 分野)」の受講希望者を募集します。この実験は、最先端の理工学の研究動向を学び、またその研究を行うために必要な高度な実験に関する知識と技術を習得することを目的としています。CAD 分野の実験は、ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー (VBL) の施設が提供する多様なソフトウェアの中から、各自の研究課題に合ったモジュールを選び、それを使用してコンピュータシミュレーションを行い、結果について考察してもらいます。

受講者には総合工学科目「最先端理工学実験」(1 単位)が与えられます。また、TA には総合工学課目「実験指導体験実習 2」(1 単位)が与えられます。

詳細は以下の通りです。TA ともにふるってご応募下さい。

### 記

- 受講対象学生：大学院博士後期課程、前期課程の学生。  
受講を希望する者は指導教員の承諾を得ること。
- TA 対象学生：大学院博士後期課程の大学院生で、課題実験、独創実験に関する十分な知識を持っていること。受講を希望する者は指導教官の承諾を得ること。
- 実験内容： ライフサイエンスモジュールを用いた実験かマテリアルサイエンスモジュールを用いた実験のいずれか一方を選択する。受講応募用紙および別紙 1 参照
- 受講者定員：  
ライフサイエンスモジュール 10 名程度  
マテリアルサイエンスモジュール 10 名程度
- 単位認定条件： 募集テーマの実験を実施し、結果の発表を行い、その評価が基準点以上である場合、「最先端理工学実験」1 単位を認定する。
- 担当教員： 渡邊 信久 教授 (生物機能工学分野)
- 応募〆切： 7 月 22 日 (金) 17:00
- 説明会： 追って連絡
- 実験： 9 月の期間中に延べ 1 週間程度で実施
- 成果発表会： 10 月後半に実施
- 応募先： 受講希望者は、締切日までに必要事項を記入した応募用紙を工学研究科教務課入学試験掛に提出して下さい。

VBL のソフトウェアの利用は下記の講習会を受講したのち行うことができます。

ライフサイエンスモジュール (Discovery Studio) は生体高分子の構築と可視化、分子力場計算 (CHARMm、CFF)、多様なコンフォメーション解析、ドッキング、生体高分子モデリングと立体構造予測、など多様なシステムを含んでいます。

マテリアルサイエンスモジュール (Material Studio) は、最先端材料の分子結晶構造の予測、モデルの構築、量子力学計算や、ポリマーの物性、局所構造の計算が可能です。

VBL でライセンスを所有するモジュールの詳細は別紙 2 を参照して下さい。

### 講習会

第 1 回講習会：9 月初旬 (調整して日程を決めます)

アクセルリスの講師が、ソフトウェア・システムの全体的解説と簡単な利用法を指導します。

第 2 回講習会：9 月下旬 (調整して日程を決めます)

アクセルリスの講師が、課題に応じたモジュールの使い方や計算内容を指導します。

その後発表会までは担当教員や T A と相談して、計算を続けてもらいます。講習会では、各自の持参するノート PC にデモライセンスをインストールして、各自が直接計算可能な環境を作ります。その後も成果発表会までのデモライセンス期間中は、それを用いて自由に計算することが可能です。

1 回目の講習会で使用方法の概要を学び、2 回目の講習会では、各自がそれぞれの課題の計算をするのに必要なモジュールの講習とシミュレーションの仕方の指導が行われます。従って、1 回目の講習会后、2 回目の講習会までに、各自課題 (何を計算するか) を決めておく必要があります。

### 成果発表会 (最先端理工学実験 (ナノプロセス分野) との合同発表会)

10 月の後半に実施します。

修了要件 (1 単位)

各自 A4 紙 1 枚の研究内容の要旨を準備し、10 分間の発表 (2 分間の討論を含む) を行うこと。発表会には最初から最後まで参加すること。

連絡先 渡邊 信久 [nobuhisa@nagoya-u.jp](mailto:nobuhisa@nagoya-u.jp)

## VBL でライセンスを保有するアプリケーションモジュール

## ライフサイエンス DiscoveryStudio シミュレーションソフトウェア

ソフトウェア群	主な機能
DS Standalone	DiscoveryStudioのユーザインターフェース 生体高分子等のモデル作成とシミュレーションの入力、計算結果、グラフの表示・作成
DS Analysis	CHARMmシミュレーション結果の解析
DS Biopolymer	タンパク質、ペプチド、DNA、RNAの生体高分子のモデリング 静電ポテンシャル及び溶媒和エネルギー計算
DS Catalyst Conformation	薬物活性に基づき分子のフレキシビリティを考慮した3Dコンフォメーションの構築
DS CHARMm	タンパク質及び複合体のMDシミュレーションエンジン CHARMmに含むCDOKERより低分子とのドッキングシミュレーション
DS Ludi	リード化合物のde novoデザイン
DS Protein Refine	タンパク質の側鎖の配向を精密化
DS Sequence Analysis	BLASTあるいはPSIBLASTによる相同性のある配列検索
DS Protein Families	配列と構造情報を用いて、複数のアミノ酸配列からマルチプルアライメントを行い、進化系統解析
DS Protein Health	Profiles3Dをアルゴリズムを用いたタンパク質の構造評価
DS Modeler	自動ホモロジーモデリング
DS CFF	タンパク質、核酸、脂質、炭水化物、低分子化合物に対応した精度の高い力場パラメータ

## マテリアルサイエンス MaterialsStudioシミュレーションソフトウェア

ソフトウェア群	主な機能
MS Visualizer	MaterialsStudioのユーザインターフェース 有機、無機材料、ポリマー等のモデル作成とシミュレーションの入力、計算結果、グラフの表示・作成
MS AmorphousCell	ポリマー、低分子化合物の非晶構造セルの作成
MS Castep	平面波基底密度汎関数法による分子、固体、表面等の第一原理計算
MS DMol3 SolidState	3D周期境界条件に対応した高速、高精度な密度汎関数法に基づく量子化学計算ソフト
MS Forcite Plus	分子、材料系の分子動力学計算 エネルギー計算／構造最適化／動力学シミュレーション
MS Morphology	結晶の形態を結晶の原子構造から予測
MS Reflex	結晶の粉末回折シミュレーション
MS Sorption	多孔質向けのモンテカルロ法による吸着シミュレーション
MS Synthia	構造物性相関手法によるポリマー物性値予測
MS Vamp	有機、無機分子を対象にした半経験的分子軌道計算

締 切：7月22日

提出先：教務課入学試験掛

## 最先端理工学実験 (CAD 分野) 受講及び TA 応募用紙

教務委員長殿

平成 23 年度最先端理工学実験 (CAD 分野) の受講を希望します。

(課題実験、独創実験、または TA のいずれかを選び、必要事項を記入してください)

課題実験

希 望 順 位	
	ライフサイエンスモジュール (Discovery Studio)
	マテリアルサイエンスモジュール (Material Studio)

別紙を参照して希望順位を記入して下さい

平成 22 年度最先端理工学実験 (CAD 分野) の TA (30 時間) を希望します

TA

氏 名	学 年	専 攻 名	指 導 教 員 氏 名
			印

内線電話番号：

E-mail：

\_\_\_\_\_