

日本液晶学会 液晶物理・物性研究フォーラム, ソフトマター研究フォーラム,  
液晶化学・材料研究フォーラム合同チュートリアル講座  
「分子動力学シミュレーションの最初の一步」

日時：2016年6月4日（土曜）10:00～18:00（9:30 受付開始）

会場：東陽テクニカ テクノロジーインターフェースセンター 9階 会議室（東京駅八重洲北口から徒歩5分 東京メトロ半蔵門線三越前 B3 出口すぐ。詳細は <http://www.toyo.co.jp/company/access/> をご覧ください。東陽テクニカ本社ではございませんのでご注意ください）

【講座趣旨】

デバイス設計、材料設計などの様々な場面において実際にものを動かしたり、用意したりすることなく性質が予測できる、あるいは実験的手法では観測することのできない情報が得られるシミュレーションの重要性、有用性は、計算機技術の発展とともにますます高まっています。シミュレーションの手法は様々ですが、対象としている分子の実際の分子構造をもとに計算を行なう分子動力学シミュレーションは、分子がどのように動いているかを見ることができるので計算結果を直観的に理解しやすいこと、また実在の物質の物性を直接計算できることが大きな特徴・利点です。

そこで、分子動力学シミュレーションの未経験者を対象として、実際にシミュレーションを行ないながら学習していただく実習形式のチュートリアル講座を企画いたしました。これまで分子動力学シミュレーションに興味を持ちながら、どんなパソコンやソフトが必要なのかわからず手が出せなかった方が、シミュレーションを始める最初の一步として本講座がお役に立つかと思えます。

また、今回の講座の参加者同士、および講師との交流をさらに深められるよう、懇親会をご用意致します。皆様のご参加をお待ち申し上げます。

【本講座の特徴】

- 実際にご自身でパソコンを操作し、シミュレーションを行ないながら学習します。またご自身のパソコンを使って行いますので、講座終了後、そのままご自身の研究等にご活用いただけます。
- シミュレーションソフトには、フリーソフトの GROMACS を用います。シミュレーション環境の導入に、費用を気にする必要がありません。
- 必要なファイルの準備、実際の計算の流れ、計算結果の解釈・可視化といった、シミュレーション未経験者がシミュレーションを始めるにあたって特に迷いがちなポイントについて丁寧に解説します。
- 実習ではもちろん、代表的な液晶分子を題材とするので、計算結果に対するイメージを容易に持っていただけたと思います。また、分子動力学シミュレーションの汎用性の高さを実感していただくために、液晶だけでなくタンパク質を題材とした実習も行ないます。

【講師】 渡辺豪 助教（北里大学 理学部）

【プログラム】

10:00～10:10	趣旨説明
10:10～12:00	イントロダクション、および持参いただいた PC 環境の動作確認（希望者）
12:00～13:00	（昼食休憩）
13:00～14:30	分子動力学シミュレーションの実習 1（液晶編）
14:30～14:45	（休憩）
14:45～16:15	分子動力学シミュレーションの実習 2（液晶編）
16:15～16:30	（休憩）
16:30～18:00	分子動力学シミュレーションの実習 3（タンパク質編）
18:00～	懇親会（東陽テクニカテクノロジーインターフェースセンター2F、会費別途）

- 午前中はご持参いただいた PC 環境の動作確認がメインになりますので、動作確認が問題なく行なえる、あるいは遠方よりお越しになる等の場合は、午後から参加されても問題ありません。午後からの参加を希望される方は、申し込みの際に「午後からの参加希望」と明記ください。
- 当日は土曜日ですので、建物への入構に特別な手順、手続きが必要になる可能性があります。その点についても、改めてお知らせいたします。

【定員】 40名(予定)

【参加費】 一般 [事前登録] 正会員：8,000円, 非会員：12,000円

[当日参加] 正会員：12,000円, 非会員：12,000円

学生 [事前・当日共] 学生会員：3,000円, 学生非会員：3,000円

※ 『賛助会員』は、一口につき5名まで正会員の参加費にて参加していただけます。なお、『賛助会員』の一覧は、下記でご覧いただけます。 <http://jlcs.jp/about/overview/CorporateMembers>

※ 日本液晶学会会員の参加費は不課税、非会員の参加費は消費税込です。

本講座への当日参加につきましては、当日用意している教材の数には限りがありますので、参加をお断りする場合があります。ご了承のほどよろしくお願いします。

【懇親会参加費】 一般・学生ともに未定 ※懇親会参加費は消費税込です。

※講座参加費および懇親会参加費は、当日受付でお支払いください

#### 【参加申し込み】

下記内容を記し、メール(件名:「チュートリアル講座参加申し込み」)にてお申し込み下さい。

1. お名前(ふりがな), 2. ご所属, 3. メールアドレス,
4. 会員種別(会員, 非会員, 学生の場合は学年 / 研究室名を記載),
5. 懇親会参加: 出席・欠席
6. その他要望等

午後からの参加を希望される方は、ここに「午後からの参加希望」と明記ください。

【事前申し込み締め切り】 5月27日(金曜)

【申し込み, 問い合わせ先】 宇佐美清章(大阪産業大学) email: [usami@ise.osaka-sandai.ac.jp](mailto:usami@ise.osaka-sandai.ac.jp)

#### 【ご参加にあたってのお願い】

ご参加にあたっては、**GROMACSを事前にインストールしたノートパソコンをご持参頂きます**。実習は、LinuxあるいはMac OSにインストールされたGROMACSでの操作を前提としておりますが、Windows上で動作する仮想PCソフトウェア(VMware Player, Oracle VM VirtualBox等)にインストールしたLinuxでもGROMACSを実行できますので、Windowsでも安心して受講いただけます。GROMACSインストールの詳細な手順は、後ほどWebにてお知らせいたします。

また当日は、関連ファイルをUSBメモリにてお渡しいたしますので、USBメモリからご自身のノートパソコンへのファイル転送が可能か、ご確認のうえご参加下さい。

最新情報については、日本液晶学会 液晶物理・物性研究フォーラム HP (<http://jlcs.jp/forum/phys/>), ソフトマター研究フォーラム HP (<http://jlcs.jp/forum/soft/>), 液晶化学・材料研究フォーラム HP (<http://jlcs.jp/forum/chem/>)をご覧ください。

#### テクノロジーインターフェースセンター (TIセンター) (東陽テクニカ HPより)



〒103-0021 東京都中央区日本橋本石町 1-1-2

#### 【地下鉄】

銀座線/東西線:日本橋駅 A1出口から徒歩5分  
半蔵門線:三越前駅 B3出口から徒歩1分/B5出口から徒歩3分

#### 【JR】

東京駅・八重洲北口から徒歩5分