

数物科学専攻	研究分野	マルチメディア科学	Lab. ID MP18
研究室Webサイト	http://cmt.w3.kanazawa-u.ac.jp		
研究課題の概要			
<p>マルチメディア科学は、計算分子科学(三浦伸一・岩崎宏)と電子状態・非線形動力学(西山宣昭・杉森公一)の二つのサブグループにより構成されています。</p> <p>【計算分子科学】 計算分子科学では、液体・溶液のような凝縮分子系の構造と動力学を支配する機構を解明するために、分子シミュレーションの手法を駆使して理論的に研究を進めています。特に新しいシミュレーション手法の開発も積極的に行っているところが特色として強調したいポイントです。研究対象は、いわゆる“分子科学”という分野名が指し示すものよりはもう少し広い領域をカバーしています。例えば、超流動ヘリウムのような量子液体を経路積分法に基づく量子シミュレーション法を用いて、その特異な物性に迫っています。また、分子機械の動作原理の理解に向けて、生体高分子系の問題にも取り組んでいます。</p> <p>【電子状態・非線形動力学】 (西山)自律的な化学反応システムである細胞の機能を理解し人為的に制御することは細胞生物学や医学における最終的な目標であるが、その実現のための強力な手法として数理モデルを用いたアプローチが近年注目されており、この分野はシステム生物学あるいは数理生物学として認知されつつある。本研究室では、このような研究分野を対象としており、現在、がんの成長・進展・転移のプロセスを記述する数理モデルの開発を行っている。本研究では、個人情報削除した患者さんから提供していただく臨床データを実際に用いてモデルを構築しようとするところに特徴がある。医薬領域においては特に、今後数理的アプローチの需要は急速に高まると考えられる。 (杉森)生命科学の現象の理解のために、量子化学・電子状態理論に基づいて、生体分子の構造・物性・反応に関する理論と計算手法を体系的に理解する。本研究室では、分子軌道理論・密度汎関数理論を用いた分子モデリングにより、生物量子化学の扱う領域を広く扱う。</p>			
博士前期課程/後期課程院生の指導方針、具体的なカリキュラム、研究室での活動等			
<p>【計算分子科学】 グループの構成員が全員参加するグループミーティングを週一回行います。スピーカーは教員を含めてメンバー全員の輪番で担当します。ミーティングでは、各自が行っている研究の発表や原著論文の紹介、あるいは関連分野のレビューをします。加えて、統計力学・量子力学の進んだ内容や分子シミュレーションに関するゼミ・輪読を別途行います。研究テーマについては、指導教員と相談しながら各自の興味とグループの状況等を勘案して決定します。</p> <p>【電子状態・非線形動力学】 本研究室で行う研究プロジェクトに関わることで、批判的思考力、問題設定力、仮説形成力、仮説検証力、コミュニケーション力などを高めることを教育目標としている。そのため、教員が一方向的に研究を指示することを行わず、教員と学生とが対等な立場で研究プランや結果について疑問を出し合い議論することを日常的に行う。</p>			
研究室生活の紹介等			
<p>【計算分子科学】 広くて見晴らしのよい、快適な研究室です。冷蔵庫も電子レンジもあります(M1)。学生にmac miniが一台ずつ与えられます。計算はサーバー室にある計算機にログインして行います(M2)。週に3回ほどゼミがあり、論文や研究を発表したり、皆で一つの本を議論し合っています(M1)。</p> <p>【電子状態・非線形動力学】 上記の本研究室の教育目標の達成のために、特に学生の自律性の育成を重視しており、日常的な研究室での活動の計画は学生自身で考えて行動することとしている。</p>			
教員からのメッセージ			
<p>【計算分子科学】 計算科学の領域は、現在多方面にわたり勢いよく拡大しています。当グループはその中で原子・分子の集合体を対象に基礎的な研究を進めています。シミュレーションのプログラムは自作して研究を実施することが多いですが、プログラミング初心者でも必ず作れるようになりますので、ご心配なく。また、ボトルネックとなる問題の理論的な分析をすすめて新しい方法を作ったり、凝縮系の物性に関する理論的な研究に興味がある人を歓迎します。コンパの好きな人は大歓迎です。</p> <p>【電子状態・非線形動力学】 (西山)システム生物学あるいは数理生物学は、発展途上の学際的研究領域であり、したがって細胞分子生物学をはじめとする実験を修得した者あるいは生物に関する知識を全く持たない計算科学を学んだ者、いずれについても受け入れる。特に計算科学について学習していない者に対しては研究遂行上必要となる数値シミュレーションや統計の基礎を学ぶ研究室独自の教育プログラムを用意している。 (杉森)電子状態理論に基づいた生命科学の理解には、物理・化学・生物学・計算科学にわたる広い学識が求められる。分野を越境できる柔軟性と、現象を様々な観点から統合的に見る力が求められる。</p>			

最近(過去3年間+必要に応じて)の修士論文題目	
修了年月	タイトル
2017.3	液体の積分方程式理論を用いた水溶液中ジペプチドの自由エネルギー地形に関する研究
2017.3	酸化ハイフアフトミンアカルロ法を用いたマルメカグーカルカ布生成手法の開発と生体高分子への応用
2016.3	変分経路積分分子動力学法によるプロトン化された水クラスターの研究
2015.3	3D-RISM/MDハイブリッドシミュレーション法を用いたシニョリン分子の構造ゆらぎの研究
2013.9	A MOLECULAR DYNAMICS STUDY ON STRUCTURAL FLUCTUATION OF A PROTONATED WATER CLUSTER (分子動力学法を用いたプロトン化した水クラスターの構造ゆらぎの研究)
2013.3	水素ハイドレート構造と揺らぎに関する研究
2012.3	プロトン化した水クラスターの熱的および量子的構造ゆらぎに関する研究
最近(過去3年間+必要に応じて)の博士論文題目	
修了年月	タイトル
研究室連絡先メールアドレス	<p>【計算分子科学】 三浦伸一 <smiura *at* mail.kanazawa-u.ac.jp></p> <p>【電子状態・非線形動力学】 西山宣昭<nnishiya *at* staff.kanazawa-u.ac.jp> 杉森公一<ksugimori *at* staff.kanazawa-u.ac.jp></p>