

目 次

1 . 科研費・受託（産学連携等）研究費・科学技術振興調整費で利用している方へ	1
2 . 期限切れファイルの消去について	1
3 . FCS 講習会「Introduction to Molecular Simulation (分子シミュレーション入門)」の案内	2
4 . 平成 20 年度のライブラリー・プログラム開発課題募集について	2
5 . 平成 19 年度の全国共同利用システム利用申請と利用期限について（再掲）	1
6 . 平成 20 年度の全国共同利用システム利用申請受付について（再掲）	2
7 . 追加負担金次年度持ち越しサービスの利用について（再掲）	2

1 . 科研費・受託（産学連携等）研究費・科学技術振興調整費で利用している方へ

科研費・受託（産学連携等）研究費・科学技術振興調整費で申請の登録番号をお持ちの方は、平成 20 年度には継続利用ができません。当該経費で利用している方は、必要なファイルを、3月中旬までに外部媒体にバックアップするか、他の継続申請を行う登録番号にファイル名を変更してください。

2 . 期限切れファイルの消去について

平成 20 年度に継続申請がされていない利用者のファイル（全システム）は、4月中旬に消去しますので、ご承知おきください。

必要なファイルは、3月中旬までに外部媒体にバックアップするか、他の継続申請を行う登録申請を行う登録番号にファイル名を変更してください。

3 . FCS 講習会「Introduction to Molecular Simulation (分子シミュレーション入門)」の案内
21 世紀 COE プログラム「計算科学フロンティア」では、下記の内容で講習会を開催します。講師
は、AMBER の開発に携わっている方々です。興味ある方の多数の参加をお待ちしています。

日 時 平成 2 0 年 2 月 4 日 (月) 1 0 時 ~ 2 月 5 日 (火) 1 6 時
場 所 情報連携基盤センター 4 階演習室

=====
Program (Tentative)

<<First day>>

Feb.4 (Mon)

- 10:00 Introduction to Amber: the theory and practice of biomolecular simulations using the Amber suite of programs
- 11:00 Continuum solvation models in Gaussian 03
- 13:00 How to set-up calculations and what to do with non-standard residues.
- 14:00 Running simple minimizations and MD simulations using the sander and pmemd modules
- 15:00 practice with PC

<<Second Day>>

Feb.5 (Tue)

- 10:00 A coupled potential QM/MM/MD simulation in Amber.
 - 11:00 ONIOM method in Gaussian 03
 - 13:00 Using dynamics simulations to estimate binding
 - 14:00 Analyzing MD results
 - 15:00 practice with PC
- =====

4 . 平成 2 0 年度のライブラリー・プログラム開発課題募集について

平成 2 0 年度のライブラリー・プログラム開発課題を次により公募します。

- 1) プログラムの内容 : 学術研究の発展に寄与するものであって、多数の利用者に共通に利用されるもの。
- 2) プログラムの種類 : 新しく開発しようとするもの。(改良及び書換えを含む)
および既登録プログラムの改良または書換え。
- 3) 応募資格 : 本センターの利用者であること。
- 4) 公募手続き : 所定の申請書類により申請する。申請用紙および公募要領は、共同利用掛 (052-789-4355) へ申し出てください。

5. 平成19年度の全国共同利用システム利用申請と利用期限について（再掲）

今年度は、全国共同利用システムの利用申請及び利用期限について、下記のとおりとなりますのでお知らせします。

1) 利用負担金の最終請求時期 : 平成20年 2月29日(金) 締め

今年度の基本負担金、追加負担金の徴収は、2月末日終了です。3月にシステムの使用を予定している方は、利用可能額(残額)を確認し、前もって追加負担金の申し込みをしてください。

ファイル料金についても、同様です。

科学研究費・産学連携等研究費等の利用者は、支払い計画を早めに立てるようご注意ください。

2) 利用申請の期限 : 平成20年 2月29日(金)

今年度内にシステム利用を予定されている方は早めに手続きをしてください。

最終請求締め切りが2月末日のため、システム利用に係る申請・追加の手続きも2月末日の締め切りとなっています(変更・取消は3月21日まで受け付けます)ので、早めに計画を立て、期限までに手続きしてください。

(2月末日までに申請・追加申込みが出来なかった場合は、3月でも受け付けますが、4月(新年度)請求となりますのでご承知ください。)

3) 利用期限 : 本年度の最終運用日(平成20年3月サービス終了日)

6. 平成20年度の全国共同利用システム利用申請受付について（再掲）

平成20年度への継続及び新規・追加の受付期間は、下表のとおりです。

申請種別	受付期間
平成20年度への継続	平成20年2月1日(金)から 平成20年3月21日(金)まで
平成20年度新規・追加	平成20年2月1日(金)から

【申請方法】

1) 継続について

平成19年度の各利用者(科学研究費及び産学連携等研究費による利用のものを除く)の支払責任者あてに、平成20年1月下旬にあらかじめ今年度の情報が出力してある継続利用申請書を送付しますので、各項目を確認(変更があれば朱書きで修正)のうえ、できる限り早く申請を行ってください。

2) 新規・追加について

平成20年2月1日(金)から受付を開始します。また、申請後に、変更・取消等が生じた場合は、随時受け付けます。

7. 追加負担金次年度持ち越しサービスの利用について（再掲）

今年度の追加負担金を平成20年1月～3月の間に申し込まれた場合、申請された追加負担金については、その年度末時点の使用可能額残高がある場合に、次年度の追加負担金持ち越し（積み増し）サービスが利用できます。このサービスを受けられる場合は、計算機利用の継続期間中（2月1日～3月21日）に申し込みをしてください。

追加負担金持ち越しサービス利用の対象

平成19年度用として平成20年1月4日～平成20年3月21日登録分

追加負担金持ち越しサービス利用申込期間

平成20年2月1日 ～ 平成20年3月21日