

## 授業案内/Syllabus

授業科目名	分子モデリングと分子シミュレーション
曜限	木5・6限
ターム・学期	S1S2
単位数	1
教員名	寺田 透 教授
授業の目標、概要	分子軌道法、分子力学法、分子動力学法、モンテカルロ法、およびこれらの応用である複合体モデリングについて解説し、実習を行います。
授業のキーワード	分子軌道法,分子力学法,分子動力学法,モンテカルロ法,複合体モデリング
授業計画	2026年 5月7日、14日、21日、6月4日 17:15～20:30 以下を予定しています: 1) 分子軌道法 2) 分子力学法 3) 分子動力学法 4) モンテカルロ法 5) 複合体モデリング
授業の方法	講義はZoomを用いて実施します。
成績評価方法	レポート内容に基づいて評価します。
教科書	特になし
参考書	・門田幸二、清水謙多郎、岸野洋久、寺田透 共編著、Web連携テキスト バイオインフォマティクス 基礎から応用、培風館、2022 ・岡崎 進、コンピュータシミュレーションの基礎、化学同人
履修上の注意・準備学習等(予習、復習)	UCSF Chimera、NAMD、Pythonを利用予定です。
その他	許可なく講義画面のスクリーンショットを撮影することや、講義の録画・録音すること、これらを第三者がわかるような形でアップロードすることは、不正行為と見なされます。講義のZoom URLを第三者に提供することも不正行為と見なされます。
関連ホームページ	<a href="https://www.iu.a.u-tokyo.ac.jp/">https://www.iu.a.u-tokyo.ac.jp/</a>
メールアドレス	<a href="mailto:info@iu.a.u-tokyo.ac.jp">info@iu.a.u-tokyo.ac.jp</a>