

講義名	生体分子シミュレーション入門		
講義開講時期	後期 2nd Half		
基準単位数	1		
代表曜日		代表時限	
研究科等	物理科学研究科		
専攻・プログラム	物理科学研究科共通		
科目区分	物理科学研究科共通		
授業を担当する教員			

担当教員

氏名

◎ 奥村 久士

岡崎 圭一

授業の概要	生体系の分子シミュレーションを行うために必要な知識について講義する。特に解析力学、統計力学の概要、分子動力学シミュレーションの基礎、全原子・粗視化分子力場、拡張アンサンブル法など生体分子のシミュレーションを効率的に行う手法、シミュレーション結果の解析方法などについて解説する。
到達目標	分子シミュレーションの手法に基づいて、生体分子の静的・動的諸性質を分子レベルで解明するための方法を学ぶ。
成績評価基準	
	成績評価基準
成績評価基準	01:A, B, C, Dの4段階評価
成績評価方法	授業への出席50%、レポート50%
授業計画	生体分子動力学シミュレーションの手法 生体分子動力学シミュレーションの解析
実施場所	分子科学研究所 研究棟 301室
使用言語	日本語または英語
教科書・参考図書	コンピュータ・シミュレーションの基礎（第2版）：分子のミクロな性質を解明するために 岡崎進, 吉井範行 化学同人