Course number	U-LAS13 10043 OJ60　U-LAS13 10043 OJ17		
Course title (and course title in English)	統合型複合科目（自然群c）：量子論から始める生物の計算・情報科学 Integrated Liberal Arts and Science with Small Group Seminars (Natural Sciences c) :Computational and Information Science of Life Starting from Quantum Theory	Instructor's name, job title, and department of affiliation	Graduate School of Science Professor,HAYASHI SHIGEHIKO Graduate School of Science Professor,FUKAI SHUUYA Graduate School of Science Associate Professor,Yuki Kurashige Graduate School of Science Assistant Professor,YAMAMOTO TAKESHI

Group	Natural Sciences	Field(Classification)	Chemistry(Foundations)

Language of instruction	Japanese	Old group	Group B	Number of credits	4

Number of weekly time blocks	2	Class style	Lecture + Seminar (Face-to-face course)	Year/semesters	2026・Second semester

Days and periods	Fri.1・2	Target year	All students	Eligible students	For all majors

[Overview and purpose of the course]

生命の活動は、呼吸や光合成などのエネルギー変換やセントラルドグマに代表される情報伝達などの多様な生命機能の協奏で維持されている。これらの生命機能は、生体を構成するタンパク質分子や核酸分子などの有する高い分子機能性によりもたらされている。生命活動がいかに神秘的に見えようとも、これらの生体分子は物理的な実体であり、それらが有する高い分子機能は物理学や化学の法則に従う。

本講義では、生命機能を維持する生体分子を物理学や化学の基礎理論である量子論から考察し、生体分子機能の物理学的・化学的な理解を得ることを目的とする。まず、量子論による分子の基礎理論を学び、それに基づきタンパク質分子の分子機能の源泉であるタンパク質構造の成り立ちやその実験的測定方法・理論的予測方法などを理解し、さらにその分子がどのように分子機能を発現するかを考察する。

講義と平行して実施される演習では、コンピュータを用いた生体分子の構造や動きの解析を行う。生体機能の量子論からの基礎付けは、コンピュータを用いた生体機能の解析を可能にする。分子の構造や性質の量子論的解析を行う量子化学計算からスタートし、次に分子機能をもたらすタンパク質分子構造の情報科学的な予測手法を学ぶ。さらに、分子機能を与えるタンパク質分子の動きを解析するために、物理法則に基づく計算科学的な手法である分子シミュレーションを実践する。

○統合型複合科目分類【理・理】
主たる課題について理系分野の要素が強く、副たる課題についても理系分野の要素が強いと考えられるもの。

[Course objectives]

分子の量子論の基礎を理解し、その基礎からつながる生体分子の構造と動きを学び、またコンピュータ演習を通じた計算・情報科学的な実践を通して、物理学・化学・生物学・情報科学の多岐にわたる学問分野を横断する今後の本学での学習の指針を得る。

[Course schedule and contents)]

（この授業では、講義と少人数演習を併せて学びます。少人数演習は 2 グループに分け、それぞれのグループの演習を 20 人ずつで行います。講義のみ、少人数演習のみの出席では授業の到達目標

Continue to 統合型複合科目（自然群c）：量子論から始める生物の計算・情報科学(2)↓↓↓

に達しません。講義・少人数演習の初回授業において講義・演習全体の解説や少人数演習のグループ分けを行いますので、必ず出席してください）

◆講義（金1、共西02）
1.イントロダクション（1 週、全担当教員）
（授業内容）講義・演習全体の目的、到達目標、成績評価の方法等を説明する。また、以下に示す三段階の講義及び演習のテーマの内容をダイジェストで紹介する。さらに、演習に向けた PC の使用法や設定を解説する。
2.量子論と化学電子論（4 週、担当教員：倉重　佑輝、林　重彦）
（概要）量子力学に基づく化学電子論の初歩を学ぶと共に、分子の化学的な性質を決定づける分子電子波動関数を解として得るためのコンピュータを用いた量子化学計算の理論的基礎を学ぶ。
（授業内容）最小限の量子力学の知識で化学電子論の初歩が理解できるように、シュレディンガー方程式の簡単な解法として変分法を学ぶ。また初歩的な線形代数で解くことが可能な変分法の問題を通して、現代化学で重要な概念となっている分子軌道の正体は何か、また便利な道具として用いられる原子混成軌道はどこから出てくるのかなど化学で用いられる様々な用語の起源を学ぶ。またコンピュータを用いて実行される量子化学計算の理論的基礎を学ぶ。
3.タンパク質の構造化学と情報化学（4 週、担当教員：深井　周也、林　重彦）
（概要）生体内の化学反応をつかさどるタンパク質の基本的な化学構造や性質を学ぶと共に、実験による立体構造決定とコンピュータによる立体構造予測・タンパク質デザインの理論的基礎を学ぶ。

（授業内容）タンパク質の構成単位であるアミノ酸の構造・性質を学ぶことから始まり、タンパク質の立体構造が階層的に形成されることを理解する。また、X線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡単粒子解析による立体構造決定法の基礎を学ぶ。さらに、コンピュータを用いてアミノ酸配列からタンパク質の立体構造を予測する手法や特定のタンパク質と結合するタンパク質のアミノ酸配列をデザインする手法の基礎を学ぶ。
4.タンパク質の分子機能と分子シミュレーション（4 週、担当教員：林　重彦、山本　武志）
（概要）生命活動を維持する様々なタンパク質分子の有する顕著な分子機能のメカニズムを学ぶと共に、タンパク質分子機能の解析のためのコンピュータを用いた分子シミュレーション手法の理論的基礎を学ぶ。
（授業内容）酵素タンパク質の顕著な触媒機能を可能にするタンパク質構造形成や化学反応制御メカニズムの物理化学を学ぶ。また、触媒機能と共役する化学－力学エネルギー変換や光－情報変換などのタンパク質のより高次な分子機能メカニズムを理解する。さらに、タンパク質分子機能を可能にするタンパク質ダイナミクスを解析する分子シミュレーションの基礎となる力学や統計熱力学の基礎を学習し、分子シミュレーションの基礎理論を理解する。
5.総合討論（1 週、担当教員：林　重彦）
（授業内容）受講者が講義と演習で学んだ内容のプレゼンテーションを行い、討論を行う。
6.フィードバック（1 週）

◆少人数演習（金2、教育院棟演習室22・24）
1.イントロダクション
（演習内容）以下に示す三段階の講義及び演習のテーマの内容をダイジェストで紹介すると共に、演習に向けた PC の使用法や設定を解説する。
2.量子化学計算演習（4 週、担当教員：倉重　佑輝、林　重彦）
（演習内容）PCを用いて、量子化学計算を実践する。Z-matrixを用いた構造定義や分子可視化ソフトを用いたモデリングにより分子を構築し、量子化学計算ソフトウェアを用いた計算を行う。その解として得られる電子波動関数を数値的・視覚的に解析することにより、化学結合の生成によるエネルギーの安定化の機構や分子の反応性など物性についての解析を行う。また変分法の注意として

Continue to 統合型複合科目（自然群c）：量子論から始める生物の計算・情報科学(3)↓↓↓

計算条件を変えた際の精度について考察する。
3.タンパク質構造予測・生成の情報科学演習（4 週、担当教員：深井　周也、林　重彦）
（演習内容）PCを用いて、タンパク質の立体構造予測・生成を実践する。データベース上にあるタンパク質のアミノ酸配列を取得し、タンパク質の立体構造を予測する。タンパク質構造可視化ソフトなどを用いて実験的に決定した立体構造と比較し、それぞれの手法の特徴を理解する。また、特定のタンパク質に結合する可能性のあるタンパク質のアミノ酸配列を設計し、複合体の立体構造予測によって評価する。計算条件を変えた場合の結果を考察し、配列設計の基本を理解する。
4.タンパク質ダイナミクス計算シミュレーション（4 週、担当教員：林　重彦、山本　武志）
（演習内容）PC を用いて、分子動力学シミュレーションを実践する。データベース上のタンパク質構造からタンパク質構造可視化ソフトなどを用いて分子シミュレーション系を構築し、分子動力学シミュレーションを実行する。実行結果をさまざまな解析手法により解析し、タンパク質ダイナミクスの特徴を理解する。また、情報科学的なタンパク質構造予測によって得られた新規タンパク質構造の安定性や特徴を、分子動力学シミュレーションを実行することにより解析し、物理化学的な理解を得る。
5.総合討論（1 週、担当教員：林　重彦）
（演習内容）受講者が講義と演習で学んだ内容のプレゼンテーションを行い、討論を行う。
6.フィードバック（1 週）

[Course requirements]

計算演習を行うため、自身のラップトップ PC の持ち込みが必要。基礎物理化学（量子論または熱力学）、もしくは基礎物理化学要論を受講していることが望ましい。

[Evaluation methods and policy]

13 回の授業・13 回の演習・2 回の総合討論での出席と参加の状況・個別内容の理解力を確かめるためのレポート課題で評価を行う。各評価項目の詳細は，初回の授業で説明する。

[Textbooks]

Not used

[References, etc.]

（References, etc.）
Introduced during class

[Study outside of class (preparation and review)]

授業で配布する資料や指示した参考資料に基づき毎回の予習・復習を行う。インターネットや関連図書を活用し、講義や演習課題課題の内容を受講者各自で調査し理解を深めることが推奨される。

[Other information (office hours, etc.)]

オフィスアワーは特に設けないが、質問は随時受け付ける。

成績証明書等では、表示文字数の制約上、英文科目名「Integrated Liberal Arts and Science with Small Group Seminars」が「ISS」と略記されます。

[Essential courses]