

電気通信大学 平成16年度シラバス

授業科目名	基礎量子化学		
英文授業科目名	Basic Quantum Chemistry		
開講年度	2004年度	開講年次	
開講学期	前学期	開講コース・課程	博士前期課程
授業の方法		単位数	2
科目区分	電気通信学研究科-量子・物質工学専攻-基礎科目		
開講学科・専攻	量子・物質工学専攻		
担当教官名	石田 尚行		
居室	東6-821		

公開E-Mail	授業関連Webページ
ishii@pc.uec.ac.jp	http://tff.pc.uec.ac.jp/www.page/Ishida.html

【主題および達成目標】
<p>量子化学という学問が、電子物性材料科学、有機化学、無機化学、生命科学に、どのように役立てられているかを紹介する。学生ひとりひとりがそれを理解して、研究室の現場で実際に使えるようになるには、さかのぼって何をどこまで学ぶ必要があるかを認識する。授業内容は、量子化学の数式を操ることもあるかもしれないが、主として分子軌道計算のアプリケーション側の理解と実践に荷重をかけたものとなる。量子化学計算を教室内で、あるいは宿題として実際にやってもらう。その意味で本講義は部分的には演習である。その経験を通じて、正しく結果を理解し、研究の考察に利用していくためには、量子化学計算の中身をブラックボックス化してはいけないことを自覚する。</p>

【前もって履修しておくべき科目】

【前もって履修しておくことが望ましい科目】
学部の量子化学関係科目

【教科書等】
<p>資料を適宜配布するか、指示によりHPよりダウンロード。 参考書として、 「量子化学入門」米沢貞次郎ら著（化学同人） 「量子化学問題の解き方 付大学院入試問題」犬塚功三著（東京化学同人） 「分子軌道法電子計算機によるその活用」菊池修著（講談社） 「有機反応と軌道概念」藤本博ら 著（化学同人） 「ウッドワードホフマン則」N.T. Anh著、三田訳（東京化学同人）</p>

【授業内容とその進め方】

- (1) 分子軌道法の応用と基礎、軌道の概念
- (2) Huckel 法を使った、"教育的"分子軌道法(学部講義の復習)
- (3) SCF 法
- (4) 分子軌道法の種別と特徴、得意分野と適用限界
- (5) MOPAC(半経験的手法), Gaussian(非経験的手法)の実践
- (6) フロンティア軌道論、軌道に支配された反応
- (7) 電荷移動相互作用、共鳴理論、励起種の化学
- (8) 物性、反応性を支配する要因

【成績評価方法および評価基準】

評価方法：

試験と課題の提出(50/50)で評価する。

合格の基準：

MOPACなどのプログラムを使って、計算機実験の提案と実践と結果の評価ができること。

授業に登場するキーワードの意味を説明できること。

理解度は総合的に判断されるものであるが、8割以上の理解で優、7割で良、6割で可、5割未満を不可とする。

【オフィスアワー：授業相談】

授業直後がベター。メールはいつでも可。

【学生へのメッセージ】

理工系大学の使命は、社会に一人前の技術者を送り出すことであり、大学院の使命は一人前の研究者を送り出すことである。一人前の研究者とは、研究の発案能力、問題設定と解答発見能力、文献調査方法の熟達、研究実施の行動力、結果の解析能力、プレゼン能力が備わった者のことだが、そのように成長できるように、意識改革をしてください。逆にいえば、このどれかが欠けた学生には卒業させたくない。このプロセスは学生個々にとって大変に重圧と責任のかかることなのに、見渡していると「言われたことだけやってりゃいいや」というような甘い学生が多いのにはまいる。