

物理科学研究科 構造分子科学専攻 2014年度開設授業科目

授業科目名：理論化学 講義 単位数 2

履修対象者：1年次～5年次

授業担当教員

江原正博（量子化学、内線 7461、ehara@ims.ac.jp、計算センター棟 223 室）

奥村久士（分子シミュレーション、内線 7277、hokumura@ims.ac.jp、計算センター棟 225 室）

授業実施時期日 前期集中（7/8,9,10,11）

実施場所 分子科学研究所 研究棟 301 室

授業概要

分子の構造と反応性を電子レベルで理解するために、電子状態理論の基礎と分子系への応用事例を学ぶ。また、多数の分子が凝縮した分子集合体の構造や動的変化を記述するための分子動力学法の基礎についても学ぶ。具体的な授業内容は以下のようである。まず、極力数式を使わずに電子レベルで分子の構造や反応性を記述するための定性的な方法論を習得する。次に、電子相関理論や密度汎関数理論に基づいて多電子系の問題を解くことによって、定量的に分子の諸性質を記述できることを理解する。授業の後半では、実在分子系への電子状態計算の応用事例やタンパク質のような大きな分子系の分子動力学計算の研究例等を挙げながら、電子レベルでの分子の構造や反応性の理解をより一層深める。

講義計画

- 1 回目 電子状態理論 1
- 2 回目 電子状態理論 2
- 3 回目 分子の諸性質 1
- 4 回目 分子の諸性質 2
- 5 回目 分子動力学法 1
- 6 回目 分子動力学法 2

成績評価基準 試験及び出席状況を総合的に判断して成績を評価して、60点以上の者に単位を認める。

オフィスアワー 授業後、教室または教員室にて。