

北海道大学シラバス					
科目名					
実践的計算化学					
講義題目					
責任教員（所属）					
武次 徹也（大学院理学研究院）					
担当教員（所属）					
武次 徹也（大学院理学研究院） 伊藤 肇（大学院工学研究院） 島田 敏宏（大学院工学研究院） 長谷川 淳也（触媒科学研究所）					
科目種別				他学部履修等の可否	可
開講年度	2020	期間	2 学期（秋ターム）	時間割番号	094055
授業形態	講義	単位数	2	対象年次	～
対象学科・クラス				補足事項	
ナンバリングコード	CHEM_REQEL 5200				
大分類コード	大分類名称				
CHEM_REQEL		総合化学院(選択必修科目)			
レベルコード	レベル				
5		大学院（修士・専門職）専門科目（基礎的な内容の科目）、大学院共通授業科目			
中分類コード	中分類名称				
2		理工共通			
小分類コード	小分類名称				
0		実践的計算化学			
言語					
日本語で行う授業					
実務経験のある教員等による授業科目					

■ ■ キーワード

計算化学、理論化学、分子軌道法、密度汎関数法

■ ■ 授業の目標

化学分野においていまや計算化学は極めて重要な研究手法となっている。この授業では、これまで研究で計算機をもちいた経験のない実験化学系や理論系の受講者であっても、計算化学の概要を理解した上で計算方法を実践的に学習し、それぞれの研究の中で使うことができるようになることを目標とする。

■ ■ 到達目標

1. 分子軌道法、密度汎関数法、励起状態計算の原理を大まかに理解できる。
2. Gaussian, GaussView などのソフトウェアの使い方を修得し、研究に活用できる。

■ ■ 授業計画

1. 計算化学の基礎と概要（武次）
2. 有機化学反応の計算機をもちいた解析（伊藤）
3. 無機化合物と有機半導体の物性計算（島田）
4. 励起状態の計算（長谷川）

■ ■ 準備学習(予習・復習)等の内容と分量

Windows7以上のノートPCを各自用意し、指定した回の授業に持参してください。
計算課題やレポート提出があります。

■ ■ 成績評価の基準と方法

学修態度(20%)、レポート(80%)によって評価する。

■ ■ 有する実務経験と授業への活用

■ ■ 他学部履修の条件

■ ■ テキスト・教科書

新版 すぐできる 量子化学計算ビギナーズマニュアル (KS化学専門書) / 武次 徹也 (編集), 平尾 公彦 (監修) : 講談社サイエンティフィック, 2015

■ ■ 講義指定図書

[Gaussianプログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験 / 堀 憲次, 山本 豪紀 : 丸善, 2006, ISBN:4621077147](#)
[電子構造論による化学の探究, ISBN:0-9636769-8-9](#)

■ ■ 参照ホームページ

■■ 研究室のホームページ

■■ 備考

ウィルス対策が施されたWindows7以上のノートルPCが必要。
受講希望者多数の場合は抽選を行うことがあります。
ソフトウェアは学内ライセンス版を活用します（追加費用なし）
ソフトのインストール作業などは授業内で行いますので事前準備不要です。
単位取得というよりは実際にスキル獲得を目指す学生が対象です。

■■ 更新日時

2020/01/19 12:56:28

Hokkaido University Syllabus					
Course Title					
Practical Computational Chemistry					
Subtitle					
Instructor (Institution)					
Tetsuya TAKETSUGU (Faculty of Science)					
Other Instructors (Institution)					
Tetsuya TAKETSUGU (Faculty of Science) Hajime ITOH (Faculty of Engineering) Toshihiro SHIMADA (Faculty of Engineering) Junya HASEGAWA (Institute for Catalysis)					
Course Type				Open To Other Faculties / Schools	OK
Year	2020	Semester	2nd Semester (Fall Term)	Course Number	094055
Type of Class	Lecture	Number of Credits	2	Year of Eligible Students	~
Eligible Department / Class				Other Information	
Numbering Code	CHEM_REQEL 5200				
Major Category Code	Major Category Title				
CHEM_REQEL	Chemical Sciences and Engineering_Required Electives Course				
Level Code	Level				
5	Specialized Subjects (basics) in graduate level (Master's Course and Professional Course), Inter-Graduate School Classes				
Middle Category Code	Middle Category Title				
2					
Small Category Code	Small Category Title				
0					
Language Type					
Classes are in Japanese.					
Course list by the instructor with practical experiences					

Key Words

Computational Chemistry, Theoretical Chemistry, Molecular Orbital Theory, Density Functional Theory

 Course Objectives

Computational chemistry has been a very important research technique in chemistry field. This course is for the students who have no experience of calculation. Objectives of this course is to make the students master how to use calculation on their research issues in accompany with understandings on general aspects of computational chemistry.

 Course Goals

1. Understand the basics of computational chemistry, theoretical chemistry, molecular orbital theory, density functional theory, excited state calculation.
2. Use Gaussian and GaussView.

 Course Schedule

1. General Introduction of Computational Chemistry - Prof. T. Taketsugu
2. Computational Analysis of Organic Reactions - Prof. H. Ito
3. Physical Properties Calculations of Inorganic Materials and Organic Semiconductors - Prof. T. Shimada
4. Excited State Calculations - Prof. J. Hasegawa

 Homework

Students should have a note PC with Windows 7 or later.
Calculation homework and reports.

 Grading System

The attitude at the lecture (20%) and report scores (80%) are evaluated.

 Practical experience and utilization for classes Condition of tasking the subject Textbooks

新版 すぐできる 量子化学計算ビギナーズマニュアル (KS化学専門書) / 武次 徹也 (編集), 平尾 公彦 (監修): 講談社サイエンティフィック, 2015

 Reading List

[Gaussianプログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験 / 堀 憲次, 山本 豪紀 : 丸善, 2006, ISBN:4621077147](#)
[電子構造論による化学の探究, ISBN:0-9636769-8-9](#)

 Websites

■ ■ Website of Laboratory

■ ■ Additional Information

Notre PC with Windows7 or later and anti-virus application is necessary.

If many applicant, the student will be determined by lottery.

Campus licensed software will be used (no extra cost). No advance preparation is required. Students aiming to real skill acquisition are favorable.

■ ■ Update

2020/01/19 12:56:29