

科目ナンバリング		U-LAS13 20010 LJ60			
授業科目名 <英訳>	理論化学入門Ⅰ Introduction to Theoretical Chemistry I			担当者所属 職名・氏名	理学研究科 教授 谷村 吉隆
群	自然科学科目群		分野(分類)	化学(発展)	使用言語 日本語
旧群	B群	単位数	2単位	週コマ数	1コマ
				授業形態	講義(対面授業科目)
開講年度・ 開講期	2025・前期	曜時限	金4	配当学年	主として1・2回生
				対象学生	理系向
[授業の概要・目的]					
理論化学は生物、化学、物理にまたがる壮大で深淵な学問体系である。その基礎的な考え方や知識は、物理化学はもちろん固体物理や無機化学、有機化学、生物物理などの理論的研究のみならず、それらの実験をデザインし、実行する上でも重要である。本授業はその基礎となる物理学、数学、計算科学などを化学物理、生物物理、固体物性などの問題に関係づけながら系統的、実践的に学ぶことを目的とする。 大学での授業は数学、物理、化学などの授業がそれぞれ独立に進み、物理に必要な数学の授業が、物理を学んでから始まったり、あるいは物理や化学での重要性を知ることなく、数学の授業が進んでしまうなど、学問の全体像を包含できないまま進むことが多い。本授業では、数学や物理的な基礎も合わせて解説するが、全体像を見極めるための概観を得ることを主眼とする。演習問題も数学的な詳細さにとらわれないように、また計算科学の基本的な考え方になじむために、WWWベースで扱えるプログラム言語Pythonを用い、固有値の対角化やフーリエ変換などは数値計算を通して行う。 前期は分子動力学、分子振動、量子力学の基礎について講義を行う。また、これらの学問体系が、実際の理論化学でどのように使われているかを示すために、実験と理論の関係についても可能な限り説明する。また、国内外の理論化学者とその研究内容についても紹介し研究者の人生について語る。 http://theochem.kuchem.kyoto-u.ac.jp/members/tanimuraj.htm					
[到達目標]					
分子動力学や分子振動、量子力学の基礎概念、それに必要な線形代数や特殊関数の基礎を理解し、その発展として生物化学物理への応用を学ぶ。プログラム言語Pythonを用いた数値計算の基礎についても習得する。WWW上で操作できる分子軌道法や分子動力学法のプログラムなどに接し、難解な理論化学に習うより慣れる。					
[授業計画と内容]					
第1週: 授業内容の概説 第2週以降: 1.分子動力学 Pythonによる数値積分 行列と逆行列 オイラー法と逆オイラー法による数値計算 シンプレクテック法による数値計算 分子動力学計算 2.分子振動と振動分光 連結バネと波動方程式 フーリエ変換とスペクトル 分子の基準振動(固有値と固有ベクトル)					
----- 理論化学入門Ⅰ(2)へ続く ↓ ↓ ↓ -----					

理論化学入門Ⅰ(2)

- 赤外振動分光とラマン分光
- 3.解析力学と分子運動
ハミルトニアンとラグランジュアン
- 4.量子分子動力学と電子状態
シュレーディンガー方程式と行列形式
特殊関数と固有ベクトル (Pythonによる数値計算)
数値解と座標変換

授業回数はフィードバックを含め全15回とする

【履修要件】

特になし

【成績評価の方法・観点】

授業中の演習またはレポート(20%)と試験の結果(80%)に基づき評価する。

【教科書】

使用しない

パワーポイント講義録を教務支援システム (PandA) に随時アップロードする。

【参考書等】

(参考書)

授業中に紹介する

【授業外学修(予習・復習)等】

・授業前に予習すべきこと

授業前にアップデートしたパワーポイント講義録に目を通しておくこと。

・復習すべきこと

講義録に関係した内容を力学・量子力学・数値解析法などの教科書を参考に、より深く復習すること。

【その他(オフィスアワー等)】

【主要授業科目(学部・学科名)】

理学部