

Course number	U-LAS70 10001 SJ50				
Course title (and course title in English)	ILASセミナー : 理論化学入門 ILAS Seminar : Introduction to theoretical chemistry		Instructor's name, job title, and department of affiliation	Graduate School of Engineering Professor, SATO HIROFUMI Graduate School of Science Assistant Professor, NISHIMOTO YOSHIO	
Group	Seminars in Liberal Arts and Sciences		Number of credits	2	Number of weekly time blocks 1
Class style	seminar (Face-to-face course)	Year/semesters	2025・First semester		Quota (Freshman) 15 (15)
Target year	1st year students	Eligible students	For all majors		Days and periods Tue.5
Classroom	32, Yoshida-South Campus Academic Center Bldg. North Wing			Language of instruction	Japanese
Keyword	基礎物理化学関連 / 量子化学 / 理論化学 / コンピュータ				
[Overview and purpose of the course]					
量子力学の誕生から100年が経った。極微の世界を記述する理論は、それまでの化学のあり方を大きく変え、現代の化学において欠くことのできない存在となっている。化学現象を物理法則に基づいて理論的に体系化する学問を理論化学と呼ぶ（高校までで見聞きしているであろう用法とは異なる）。この講義では、その基礎、とりわけ化学現象を量子力学に基づいて考察する「量子化学」分野を中心に解説する。					
[Course objectives]					
量子化学について基礎的概念と、それに基づく初歩的な解析手法を修得することを目指す。					
[Course schedule and contents]					
教科書やプリントについて、受講者が順番に内容について解説し、それをもとに議論する形式（輪講）で行う。また、これらの理論を実践する計算についても学ぶ。					
1：導入として、理論化学の位置付けと必要性について具体例をあげながら解説する（1回、佐藤）					
2：量子力学の世界を知る。Schrodinger方程式と、その原子や分子などへの応用について学ぶ（7回、佐藤他）					
3：具体的な分子を対象とした計算手法について学ぶ（6回、西本）					
4：フィードバック（1回）					
[Course requirements]					
None					
[Evaluation methods and policy]					
議論への参加の積極性に基づき総合的に評価する。					

Continue to ILASセミナー : 理論化学入門(2)					

ILASセミナー：理論化学入門(2)

[Textbooks]

ジョージ・ピメンテル (著), R.D.スプレイトレイ (著), 千原 秀昭 (翻訳) 『化学結合 その量子論的理解』 (東京化学同人) ISBN: 978-4807900992

[References, etc.]

(References, etc.)

Introduced during class

[Study outside of class (preparation and review)]

高校までで学んできた基本的な数学について復習しておくことが望ましい。

[Other information (office hours, etc.)]

後半の回でパソコンを用いた演習を行うため、ノートパソコンの持参が必要となる。

[Essential courses]