

シラバス参照

科目名	情報化学
科目名(英字)	Information Chemistry
ナンバリング	14CB06
年次	3年次
単位数	2
期間	後期
担当者	村田 理尚(ムラタ ミチヒサ) 小林 久芳(コバヤシ ヒサヨシ)

授業のねらい・概要

私たちの身の回りにある物質がどのような構造をもち、どのような性質を示すのか。量子化学計算とコンピューターの発展によって、それらを的確に予想したり、可視化することが可能になってきました。「情報化学」の講義では、計算化学の手法やデータ解析を実習形式で学び、分子の構造や反応、性質の理解を深めます。現代では必須となりつつある計算化学の実践的技術を身につけ、データを論理的に考察してレポートにまとめる能力を養うことを目的とします。

授業計画

	テーマ	内容・方法等	予習／復習
第1回	はじめに(講義室にて): 情報化学としての量子化学計算	Schrödinger方程式の数値解法としての分子軌道法と密度汎関数法。GaussianおよびGaussViewプログラムの説明と起動。簡単な分子(H <sub>2</sub> O、CO <sub>2</sub> )の構造最適化。	予習:シラバスを熟読し、あらかじめ量子化学計算について調べる。 復習:実験化学と計算化学の違いを説明できるようにする。(1.5時間)
第2回	分子軌道計算:基礎編 (1)振動数計算と自由エネルギー計算	エネルギー勾配法の利用、エネルギーの座標による二階微分を用いた簡単な分子の基準振動モードおよび自由エネルギー計算。	予習:ギブズの自由エネルギーについてまとめる。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)
第3回	分子軌道計算:基礎編 (2)簡単な分子の励起エネルギー計算	密度汎関数法について。時間依存密度汎関数法を用いた共役系分子の電子励起エネルギーの計算(エチレン、ブタジエン、ヘキサトリエン)。	予習:マクマリー第14章の該当箇所を読み、共役ジエンについて整理する。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)
第4回	分子軌道計算:基礎編 (3)NMRスペクトルのシミュレーション	HおよびC-NMRスペクトルのシミュレーション。メタンとテトラメチルシラン(TMS)の遮蔽定数と化学シフトの計算。応用例として、エタノールの化学シフト値の説明。	予習:マクマリー第13章の該当箇所を読み、NMRについて整理する。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)
第5回	分子軌道計算:基礎編 (4)簡単な反応の遷移状態計算と反応座標計算 (1)	仮想的なDiels-Alder反応として、エチレン+ブタジエン→シクロヘキセンを扱う。遷移状態から極限反応座標により原系および生成系までの反応座標を描く。	予習:マクマリー第14章の該当箇所を読み、Diels-Alder反応について整理する。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)
第6回	分子軌道計算:基礎編 (5)簡単な反応の遷移状態計算と反応座標計算 (2)	より現実的な系としてアクロレインとメキシブタジエンのDiels-Alder反応を扱う。応用例としてCope転移の遷移状態計算。	予習:マクマリー第14章の該当箇所を読み、Diels-Alder反応について整理し、章末問題に取り組む。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)
第7回	分子軌道計算:基礎編 (6)溶媒効果と軌道等値面の表示	溶媒分子を用いない分極性連続媒体モデルによる溶媒効果の計算。応用例として、水の不均化反応、2H <sub>2</sub> O → H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + OH <sup>-</sup> の平衡定数を計算する。また、分子軌道をGaussViewで描く練習を行う。	予習:マクマリー第6章の該当箇所を読み、平衡定数について整理する。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)
第8回	分子軌道計算:応用編 (1) 共役化合物の構造最適化	フルオレンと9-フルオレンの構造最適化	予習:マクマリー第19章を読み、整理する。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)
第9回	分子軌道計算:応用編 (2) 共役化合物の分子軌道	フルオレンと9-フルオレンの分子軌道の計算とデータ解析	予習:マクマリー第19章を読み、章末問題に取り組む。 復習:講義内容をまとめる。(4.5時間)

第10回	分子軌道計算: 応用編 (3) カルボニル化合物の電荷, 双極子モーメント	フルオレンと9-フルオレノンの電荷と双極子モーメントの計算, データ解析	予習: マクマリー第19章を読み、章末問題に取り組む。 復習: 講義内容をまとめる。 (4.5時間)
第11回	分子軌道計算: 応用編 (3) 共役化合物の静電ポテンシャル	フルオレンと9-フルオレノンの静電ポテンシャルの計算とデータ解析	予習: マクマリー第14章を読み、整理する。 復習: 講義内容をまとめる。 (4.5時間)
第12回	分子軌道計算: 応用編 (5) 色素材料の紫外・可視吸収スペクトル	吸収スペクトルのTD-DFT計算とデータ解析	予習: マクマリー第14章を読み、章末問題に取り組む。 復習: 講義内容をまとめる。 (4.5時間)
第13回	分子軌道計算: 応用編 (6) 求核置換反応の遷移状態	ハロゲン化アルキルのSN2反応の遷移状態計算とデータ解析	予習: マクマリー第11章を読み、章末問題に取り組む。 復習: 講義内容をまとめる。 (4.5時間)
第14回	まとめ	第1-13回の内容の理解度を確認する。これまでの実習内容に関して補足説明をする。確認テストと解説。	予習: これまでに行った内容を整理し、十分に理解を深めておくこと。 復習: 補足説明や解説に基づき、実習内容に関する理解を深めること。 (4.5時間)

- 到達目標
- (1) 遅刻・欠席することなく、すべての項目を実施する。
  - (2) 化学反応の機構を理解し、分子の構造最適化を実施できる。
  - (3) 分子の静電ポテンシャルを計算・可視化することができ、性質を説明できる。
  - (4) 分子軌道を可視化することができ、反応や性質を説明できる。
  - (5) 量子化学計算によるデータ解析を行い、結果を説明することができる。

評価方法

授業中に実施する実習課題を提出することを前提として、受講態度に基づく平常点とレポート、ならびに確認テストで評価する。具体的には平常点 30%とレポート50%, 確認テスト20%を合算して評価する。

成績評価基準

到達目標(1)~(5)を達成した上で、評価方法に記載の通り採点して、  
A: 到達目標すべてを総合して 90% 以上達成できている。  
B: 到達目標すべてを総合して 80% 以上 90% 未満達成できている。  
C: 到達目標すべてを総合して 70% 以上 80% 未満達成できている。  
D: 到達目標すべてを総合して 60% 以上 70% 未満達成できている。  
F: 上記以外。

教科書

	書名	著者名	出版社名
参考書	1. マクマリー有機化学(上・中・下)第9版	J. McMurry著, 伊東, 児玉, 荻野, 深澤, 通 訳	東京化学同人
	2. 新版 すぐできる 量子化学計算ビギナーズマニュアル	平尾 公彦(監修), 武次 徹也(編集, 著)	講談社

受講心得

教科書は使用しないが、毎回、各回の計算理論と作業内容を纏めたプリントを配布する。コンピューターを用いた実習形式で授業を行う。指定した内容について予習した上で授業に臨み、授業内容をその時間内に理解できるように努めること。

オフィスアワー

村田 理尚 月曜日 5 限 10 号館 9 階 村田准教授室(1009N 号室)  
新規採用教員(シンキサイヨウキョウイン) 授業の前後に対応する。

実践的教育

【実践的教育】大手化学メーカーで機能性材料の研究開発に携わった経験を持つ教員が、その経験を活かして有機化合物の量子化学計算について講義する。