

## 2024 年度次世代講義シラバス

科目名	量子化学計算セミナー	言語: 日本語
担当教員名	本田 康 (HPC システムズ株式会社)	
実施時期	2024 年 9 月 19 日 (水) 13:00-18:00	
実施場所	ITbM 1 階 レクチャールーム	
<p><b>【講義目標・内容】</b></p> <p>本講義では、Gaussian による量子化学計算を行う上で必要となる基礎知識の体系的な習得と、実践するための技能の獲得を目指す。また、発展的な内容として、励起状態計算および量子コンピュータの量子化学計算への応用に関する話題も取り上げる。</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. 量子化学および Gaussian の基礎知識</li><li>2. Gaussian の使い方 (入力ファイルの作成と計算結果の解析)</li><li>3. 計算手法と基底関数の選び方</li><li>4. 励起状態計算入門 (UV-Vis スペクトル計算および構造最適化)</li><li>5. 量子コンピュータの概要と量子化学計算への応用</li></ol> <p><b>【成績評価の方法】</b></p> <p>講義への出席とレポートにより評価する。レポート課題は講義の中で発表する。</p> <p><b>【履修条件・注意事項など】</b></p> <p>事前に Gaussian および GaussView をインストールした PC を準備すること。</p> <p><b>【履修登録方法】</b></p> <p>GTR 学生支援室が指定する期限までに、e ポートフォリオで参加登録を行う。</p>		