

登録コード	F3C14530	開講年度	2026			
授業科目	量子化学				担当教員	小嶋 隆幸
英文授業名	Quantum Chemistry				副担当	
単位数	2	講義期間	前期	曜日・時限	火曜・1時限	対象学生
講義室	織総研棟ミーティングルーム1		授業形態	講義	遠隔授業科目	備考
信大コンピテンシー	非該当					
(1)授業の達成目標	授業で得られる「学位授与の方針」要素				⇔	【授業の達成目標】
	2 2 Fカリ					
	【2022年度以前カリキュラム対象】自立した研究者・技術者として行動する能力				⇔	現代化学の基礎となっている原子や分子の量子化学的捉え方ができるようになる。
	2 4 Fカリ・化学材料, 2 3 Fカリ・化学材料					
	【2023年度以降カリキュラム対象】共通教育による幅広い教養と、化学・材料に関する基礎科学を理解できる能力				⇔	現代化学の基礎となっている原子や分子の量子化学的捉え方ができるようになる。
	【2023年度以降カリキュラム対象】化学・材料に関して、実験方法を理解し、専門的に解析および考察できる能力				⇔	量子論に基づいて分子の電子構造を解析・考察できるようになる。
(2)授業で学べる「テーマ」	その他					
(3)全学横断特別教育プログラム						
(4)授業の概要	一般の多電子原子の電子構造を量子化学に基づいて説明し、その電子配置を考える際には電子スピンと軌道角運動量が重要な役割を果たすことも合わせて述べる。 水素分子とそのイオンを初めとした種々の二原子分子に対し、分子軌道法（MO法）による分子の電子構造に対する理論的解析について説明する。また、分子の電子構造を考える際に重要な概念である価電子結合法（VB法）も紹介する。 MO法の多原子分子への適用の例として「ヒュッケル法」を取り上げ、いくつかの分子への応用を示す。また、無機化学や有機化学においても重要な概念である「混成軌道」を量子化学的観点から説明する。					
(5)授業計画	この講義は100分授業で実施する。 第1回：量子力学のまとめ：量子化と水素原子の原子軌道、原子単位、電子スピン 第2回：ボース粒子とフェルミ粒子、多電子原子の電子構造：軌道近似 第3回：多電子原子の電子構造：SCF法、変分原理 第4回：多電子原子の電子構造：遮へいと浸透、構成原理、スピン多重度 第5回：電子状態の分類：原子項 第6回：スピン-軌道相互作用、分光学的選択則 第7回：前半のまとめと理解度チェック 第8回：原子価結合（VB）法と混成軌道 第9回：分子軌道（MO）法：水素分子イオン 第10回：分子軌道（MO）法：等核二原子分子 第11回：分子軌道（MO）法：異核二原子分子 第12回：多原子分子：ヒュッケル法 第13回：MOで考える多原子分子の化学反応 第14回：多原子分子の応用例：固体のバンド理論と電気伝導、授業アンケート 第15回：期末試験					
(6)成績評価の方法	以下を評価のポイントとし、前半の理解度チェックの結果42点および期末試験58点の合計100点満点で判定する。 ・量子化学の基礎として重要な原子軌道やスピンを理解する。 ・原子項の意味を理解し、簡単な電子配置に関しては原子項を書く事ができる。 ・分子軌道の概念を理解し、原子間の結合様式（σ、π等）を区別できる。 ・VB法や混成軌道の概念を理解する。 ・ヒュッケル法を用いて、単純な分子のπ電子軌道を計算できる。					
(7)成績評価の基準	上記(4)に示した配点における合計が、6割以上であれば「水準にある」、7割以上なら「やや上にある」、8割以上なら「かなり上にある」、9割以上なら「卓越している」。					
(8)事前事後学習の内容	この授業には60時間以上の時間外学習が必要となる。 【事前学習】：事前オンデマンド動画を必ず視聴すること。 【事後学習】：e-ALPSに当日の講義の録画および板書をアップロードするので、必ず復習すること。 (3)授業計画の各回に対応する教科書の箇所は下記の通りである。ただし、教科書を事前に読むだけではなかなか理解しにくいので、特に復習に力を入れてほしい。 第1回：量子力学の講義内容を復習しておくこと + 9B・1(b) (p.392-393) 第2回：9B・1（(d)を除く） (p.391-395) 第3回：9B・3 (p.400-401)、10D・2 (p.447) 第4回：9B・1(d) (p.395-396)、9B・2(a) (p.397-398)、9C・2(a) (p.405) 第5回：9C・2(c)、(d) (p.408-412) 第6回：9C・2(b)、(e) (p.406-408、412) 第7回：10A (p.423)、10A・1 (p.424-426) 第8回：10A・2 (p.426-430)					

(8)事前事後学習の内容	第9回：10B (p.431-436) 第10回：10C・1、2 (p.437-443) 第11回：10D (p.445-451) 第12回：10E・1、2、3 ((c)を除く) (p.452-459) 第13回：ヒュッケル法の続き (10E・2) 第14回：18B・1(b) (p.806-808)、18C・2(a)、(b) (p.817-821)
(9)履修上の注意	理解できないことがあったら友人や教員に聞くなどして、できるだけ早めに解決すること。
(10)質問,相談への対応	随時受け付ける。なるべく対面で聞いてほしい。
(11)学生へのメッセージ	近年「計算化学」の目覚ましい発展により、その専門家でなくとも比較的容易に分子の量子化学計算が可能となった。ところが、その計算結果の解析を適切に行うためには、量子化学を修得しておく必要がある。そして、この講義で紹介される概念は現代化学一般で採用されており、量子化学計算を行わない者にとっても重要であるので、しっかりと履修して欲しい。
(12)その他	上記(3)授業計画の第13回のみアトキンスの下巻を、それ以外は上巻を用いる。
【教科書】	アトキンス 物理化学 (上・下) 第10版、Peter Atkins・Julio de Paula 著、中野元裕・上田貴洋・奥村光隆・北河康隆 訳、東京科学同人
【参考書】	量子化学: 基礎からのアプローチ、真船文隆 著、化学同人、3600円+税 量子化学 上巻、原田義也 著、裳華房、5,000円+税