

登録コード	SSC03500	開講年度	2026				
授業題目	量子化学					担当教員	大木 寛
英文授業名	Quantum Chemistry					副担当	
単位数	2	講義期間	前期	曜日・時限	月曜・2時限		
講義室	理学部第9講義室				備考		
信大コンピテンシー	非該当						
(1)授業の達成目標	【ディプロマ・ポリシー】				【授業の達成目標】		
	2 6 SSカリ・理学, 2 5 SSカリ・理学, 2 4 SSカリ・理学						
	【DP5】専門知識に基づいた見識を持ち, その妥当性を理論的に説明し, 議論する能力				量子化学、特に時間に依存する量子化学を正しく理解し、説明できる		
(2)授業の概要	"TRANSIENT TECHNIQUES IN NMR OF SOLIDS"(B.C.Gerstein、C.R.Dybowski 著)の輪読を行う。発表者は英語を正確に読み、正しく直訳すること。また、方程式と方程式の間の誘導を求められた場合には、正しく、詳しく、迅速に行うこと。章末の演習問題はすべて解答する必要がある。						
(3)授業のキーワード	量子化学 時間に依存する摂動論 核磁気共鳴						
(4)授業計画	1. Introduction 2. The Relation between Magnetic Moment and Angular Momentum 3. The Force on, and the Resulting Motion of, a Dipole in a Magnetic Field 4. Macroscopic Moments 5. The Bloch Equations: Relaxation 6. The Rotating Frame 7. The Pulse NMR Experiments: Pulse and Fourier-Transform NMR 8. Relaxation in the Rotating Frame: T1r 9. Dirac's Picture of Quantum Mechanics 10. Observables: Physical Interpretation 11. Angular Momentum Operators and Eigenstates 12. Spin-1/2 13. The Schrodinger Equation for Spin-1/2 with a Zeeman Interaction 14. The Single-Particle Probability Operator 15. The Spin-1/2 Problem with an Arbitrary Hamiltonian: The Density Operator						
(5)成績評価の方法	普段のゼミにおける発表・発言の状況および演習問題に対する解答の状況を総合的に判断し成績を評価する。						
(6)成績評価の基準	発表・発言および演習問題に対する解答の状況の得点率による評価基準は次のとおりとする。 90%以上 秀、89-80% 優、79-70% 良、69-60% 可、59%以下 不可						
(7)事前事後学習の内容	担当回以外も予習、復習すること。						
(8)履修上の注意	量子化学の基礎知識があることを前提としているので、あらかじめ量子化学を復習しておくこと。						
(9)質問,相談への対応	在室中随時						
【教科書】	B. C. Gerstein and C. R. Dybowski, TRANSIENT TECHNIQUES IN NMR OF SOLIDS (ACADEMIC PRESS, INC., 1985)。						
【参考書】	なし						