

登録コード	T1AB1300		開講年度	2026		市民開放授業			
授業科目	量子化学(16T以降)					担当教員	田中 秀樹		
英文授業名	Quantum Chemistry					副担当			
単位数	2	講義期間	前期	曜日・時限	金曜・2時限		対象学生	物質化学科3年生	
講義室	工W2-501教室			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 5Tカリ, 2 3Tカリ								
	【22T～】専門分野における専門的学力が身についている。					⇔	・量子化学の基礎知識を習得する。 ・原子構造および分子軌道法に基づく分子構造を理論的に説明できるようになる。 ・近年、広く用いられている分子軌道計算ソフトウェアをそのマニュアルを読んで使用するための基礎知識を持つ。		
(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	量子化学は量子力学を化学に応用したものであるが、これを解析的に適用できるのは水素原子と水素分子イオンのみである。しかし、近年のコンピューターの進歩によって、複雑な多原子分子についての量子化学(分子軌道)計算を行うことが可能となり、現代化学において分子軌道計算ソフトウェアは必須のツールとなっている。よって本講義では、将来、分子軌道計算を行うにあたって必要となる基礎知識を学ぶことをねらいとし、量子力学の起源、運動の量子論とこれを応用した原子構造・原子軌道の記述、原子軌道の分子軌道への拡張、分子軌道法による分子構造および物性の計算、分子による電磁波の吸収・発光(分子分光学)、光反応などについての講義を行う。								
(5)授業計画	第1回：量子論への導入ー起源・シュレーディンガー方程式 第2回：量子論への導入ー演算子・不確定性原理 第3回：並進運動の量子論 第4回：振動運動の量子論 第5回：回転運動の量子論 第6回：原子構造ー水素型原子 第7回：原子構造ー電子スピン 第8回：原子構造ー多電子原子 第9回：原子構造ー原子スペクトル 第10回：二原子分子の分子軌道ー水素分子 第11回：二原子分子の分子軌道ー等核・異核二原子分子 第12回：多原子分子の分子軌道ー混成軌道 第13回：多原子分子の分子軌道ーヒュッケル近似 第14回：計算量子化学 第15回：光化学、授業アンケート 定期試験								
(6)成績評価の方法	授業で毎回実施する小テストおよび期末試験によって、量子化学の基礎的事項を理解しているかを評価する。 90点以上を秀, 90点未満ー80点以上を優, 80点未満ー70点以上を良, 70点未満ー60点以上を可とする。出欠の確認には「出席確認システム」を利用する。								
(7)成績評価の基準	小テストおよび期末試験(「アトキンス 物理化学(上)第10版」の演習問題レベル)における合計得点が60点ー69点の場合を「水準にある」, 70点ー79点の場合を「やや上にある」, 80点ー89点の場合を「かなり上にある」, 90点ー100点の場合を「卓越している」とする。								
(8)事前事後学習の内容	授業毎の事前配布資料(eALPS), 教科書, 参考書によって授業内容の理解を深めること。 本授業の単位修得には、以下に示すように90時間の学修が必要である。 授業時間30時間(2時間×15回)＋自習学習時間60時間(4時間×15回)＝90時間								
(9)履修上の注意	授業の進捗によって授業計画を変更する場合がある。								
(10)質問,相談への対応	授業後に受付可能。来室しての質問の場合は予めE-mailにて連絡のこと。 E-mail: htanaka_at_shinshu-u.ac.jp (_at_を@に置き換えて送信すること)								
(11)その他									
【教科書】	「アトキンス 物理化学(上)第10版」中野元裕・上田貴洋・奥村光隆・北河康隆 共訳(東京化学同人)(税込6,270円)								
【参考書】	・「量子化学(上巻)」原田義也(裳華房) ・「光化学Ⅰ」井上晴夫・高木克彦・佐々木政子・朴鐘震 共著(丸善)								