

2025 年度シラバス

科目分類/Subject Categories			
学部等/Faculty	/工芸科学部/工芸科学部 : /School of Science and Technology/School of Science and Technology	今年度開講/Availability	/有/有 : /Available/Available
学域等/Field	/生命物質科学域/物質・材料科学域 : /Academic Field of Materials and Life Science/Academic Field of Materials Science	年次/Year	/3年次/3年次 : /3rd Year/3rd Year
課程等/Program	/物質工学課程・課程専門科目/応用化学課程・課程専門科目 : /Specialized Subjects for Undergraduate Program of Chemistry and Materials Technology/Specialized Subjects for Undergraduate Program of Applied Chemistry	学期/Semester	/後学期/後学期 : /Second term/Second term
分類/Category	// : //	曜日時限/Day & Period	/金 2 : /Fri.2

科目情報/Course Information				
時間割番号 /Timetable Number	11525201			
科目番号 /Course Number	11560023			
単位数/Credits	2			
授業形態 /Course Type	講義 : Lecture			
クラス/Class				
授業科目名 /Course Title	分子量子化学 : Molecular Quantum Chemistry			
担当教員名 / Instructor(s)	/湯村 尚史/本柳 仁 : YUMURA Takashi/MOTOYANAGI Jin			
その他/Other	インターンシップ実施科目 Internship	国際科学技術コース提供科目 IGP	PBL 実施科目 Project Based Learning	DX 活用科目 ICT Usage in Learning
	実務経験のある教員による科目 Practical Teacher			
科目ナンバリング /Numbering Code	B_AP3320			

授業の目的・概要 Objectives and Outline of the Course	
日	多原子分子の構造・物性・反応性や分子の挙動のスペクトルの観測などについて、量子化学的な立場から理解できる素養は、現在では広く一般的に求められている。本講義では、量子化学に基づいて記述される化学結合や電子状態を理解し、さらに、電子状態と分子の諸性質との関連を理解する。
英	A background of quantum chemistry is commonly required to understand all of the chemical events, i.e. structures, properties, and reaction behaviors of molecules and spectroscopy that experimental chemists heavily rely on. This lecture course provides students with basic concepts and methodology of quantum chemistry leading to an understanding of the relations of electronic structure of molecules to their physicochemical properties.

学習の到達目標 Learning Objectives	
日	原子とその結合体である分子のようなミクロな世界の現象を理解する。 量子力学の考え方が理解できる。 水素類似原子の電子状態の量子化学的取り扱い、および、関連する諸概念が理解できる。 多電子原子の電子状態の量子化学的取り扱い、および、関連する諸概念が理解できる。

	<p>変分法の適用と、化学結合の量子化学的取り扱い、および、関連する諸概念が理解できる。</p> <p>パイ電子系について、単純ヒュッケル法の取り扱いが理解でき、実際に演算できる。</p> <p>単純ヒュッケル法で得られる固有値と固有関数と分子の（電子）構造との関連が理解できる。</p> <p>単純ヒュッケル法で得られる固有値と固有関数と分子の反応性との関連が理解できる。</p> <p>波動関数が満たすべき条件が理解できる。</p> <p>ハートリー近似とハートリーホック近似の違いを理解する。</p> <p>ハートリーホック近似を原子に応用した際の結果を理解することができる。</p> <p>ハートリーホック近似を分子に応用し、その計算方法を理解することができる。</p> <p>摂動法を用いて電子相関を理解する。</p> <p>密度汎関数法の原理を理解する。</p> <p>密度汎関数法計算から何が得られるかを理解する。</p>
英	<p>Understand microscopic phenomena at atomic and molecular levels</p> <p>Understand basic concept and methodology of quantum mechanics</p> <p>Understand electronic states of hydrogenic atoms and related issues from a view point of quantum chemistry</p> <p>Understand electronic states of many-electron atoms and related issues from a view point of quantum chemistry</p> <p>Apply approximation techniques based on variational and perturbational theories to understand chemical bondings and related issues</p> <p>Understand and apply simple H&#252;ckel method of pi-electron system</p> <p>Understand the relationship between characteristic value and molecular orbital</p> <p>Apply simple H&#252;ckel method for conjugated molecules to understand their chemical and physical properties</p> <p>Understand conditions that should be obeyed by wavefunctions</p> <p>Understand differences between Hartree approximation and Hatree-Fock approximation</p> <p>Understand concepts obtained from applying Hartree-Fock approximation to atoms</p> <p>Understand how total energy of a molecule can be obtained by Hartree-Fock approximation</p> <p>Understand electron correlation by using perturbation theory, that cannot be obtained from Hartree-Fock approximation</p> <p>Understand density functional theory</p> <p>Understand what infomation can be obtained from density functional theory calculations by using Gaussian programs</p>

学習目標の達成度の評価基準 / Fulfillment of Course Goals (JABEE 関連科目のみ)

日	
英	

授業計画項目 Course Plan			
No.		項目 Topics	内容 Content
1	日	量子力学の基礎・原子軌道	波動方程式、演算子、観測量、固有値 水素類似原子の波動方程式、量子数
	英	The foundations of quantum mechanics and Hydrogenic Atoms	Wave function, Operators, Eigenvalues, Observables Wavefunction of hydrogenic atoms, Quantum number
2	日	化学結合	LCAO 変分法、重なり積分、クーロン積分、共鳴積分 分子軌道、結合性・反結合性、結合次数、等核二原子分子
	英	Chemical bond	Variational principle, Overlap integral, Coulomb integral, Resonance integral Molecular orbital, Bonding/Antibonding, Bonding order, Homonuclear diatomic molecules
3	日	パイ共役化合物（１）	単純 Hückel 法、直鎖非局在系
	英	Pi-Conjugated molecule (1)	Simple Hückel method, Linear conjugated molecules
4	日	パイ共役化合物（２）	環状非局在系、芳香族性
	英	Pi-Conjugated molecule (2)	Cyclic conjugated molecules, Aromaticity
5	日	化学反応性理論（１）	ウッドワード・ホフマン則、分子内反応、閉環反応
	英	Molecular orbital theory for chemical reaction (1)	Molecular orbital theory for chemical reaction (1)
6	日	化学反応性理論（２）	分子間反応、ディールズ・アルダー反応
	英	Molecular orbital theory for	Intermolecular reaction, Diels-Alder reaction

		chemical reaction (2)	
7	日	光学的特性理論	吸収と発光、蛍光消光
	英	Photonic properties of conjugated molecule	Absorption and luminescence, Luminescence quenching
8	日	中間試験	前半部分の理解度をテストする
	英	Midterm examination	Asking questions associated with issues learned from the first half lessons
9	日	波動関数の性質	スピン、パウリ原理、反対称的な波動関数、スレーター行列式
	英	wavefunction	spin, The Pauli principle, asymmetric orbitals, slater determinant
10	日	Hartree 近似	Hartree 近似 自己無撞着場の方法 (SCF 法)
	英	Hartree approximation	Hartree approximation, self-consistent field
11	日	Hartree-Fock 近似の原子への応用	交換項、構成原理、マードルング則、フント則
	英	Hartree-Fock approximation on atoms	exchange integrals, Aufbau principle, Madelung rule, Hund rule
12	日	Hartree-Fock 近似の分子への応用	電子配置、分子軌道、Roothann-Hall 式
	英	Hartree-Fock approximation on molecules	electronic configuration, molecular orbitals, Roothann-Hall equation
13	日	摂動法計算	ポスト Hartree-Fock 近似、摂動法、電子相関
	英	perturbation theory	perturbation theory, Post-Hartree-Fock approximation, electron correlation
14	日	密度汎関数法計算	密度汎関数法計算、Hohenberg-Kohn の定理、Kohh-Sham 方程式
	英	Density Functional Theory	density functional theory calculations, Hohenberg-Kohn theory, Kohh-Sham equation
15	日	量子化学計算 の実際	Gaussian プログラムを用いた Diels-Alder 反応解析、遷移状態、安定構造、分子軌道の波動関数
	英	Application of quantum chemistry calculations to chemistry	Interpretation of Diels-Alder reaction by using Gaussian program, transition state, local minima, wavefunction of molecular orbitals

履修条件 Prerequisite(s)	
日	物理化学 I, 物理化学 II が履修されていること。物質物理化学 I が履修され、量子化学の基礎を理解していることが望ましい。
英	Taking basic courses such as "physical chemistry I and II" is indispensable, Taking the course "Material Physical Chemistry I" and understanding the basics of quantum chemistry are desirable.

授業時間外学習（予習・復習等） Required study time, Preparation and review	
日	数学・物理学の基礎知識が必要である。予習・復習をしっかりと行うこと。課されたレポート課題は自ら解くこと。
英	Basic knowledge on mathematic and physics is required. Do preparation for the lessons and review the lessons. Make reports given in the classes by yourself.

教科書／参考書 Textbooks/Reference Books	
日	参考書：アトキンス物理化学上、下 (P.W. Atkins 著、千原、中村共訳、東京化学同人) ／ はじめて学ぶ量子化学 (阿部正紀 著、培風館) ／ 量子化学 (原田義也 著、裳華房)
英	Reference books: Physical Chemistry (P. W. Atkins, Oxford) / Quantum Chemistry for beginners (Masaki Abe, Baifu-kan) / Quantum Chemistry (Yoshinari Harada, Shoka-bou)

成績評価の方法及び基準 Grading Policy	
日	中間および学期末試験の成績および、授業時に課すレポートの提出状況や内容等で評価する。これらに対する配点の割合は試験 50%、レポート 50% とする。
英	Midterm and end-of term examinations (50 %) as well as reports given in lessons (50 %)

留意事項等 Point to consider	
日	
英	

