

科目ナンバリング		U-LAS70 10001 SJ50					
授業科目名 <英訳>	ILASセミナー：理論化学入門 ILAS Seminar: Introduction to theoretical chemistry			担当者所属 職名・氏名	工学研究科 教授 佐藤 啓文 理学研究科 助教 西本 佳央 工学研究科 准教授 森 俊文		
群	少人数群	単位数	2単位	週コマ数	1コマ	授業形態	ゼミナール(対面授業科目)
開講年度・ 開講期	2026・前期	受講定員 (1回生定員)	15 (15) 人	配当学年	1 回生	対象学生	全学向
曜時限	火5	教室	共北32			使用言語	日本語
キーワード	基礎物理化学関連 / 量子化学 / 理論化学 / コンピュータ						
【授業の概要・目的】							
量子力学の誕生から100年が経った。極微の世界を記述する理論は、それまでの化学のあり方を大きく変え、現代の化学において欠くことのできない存在となっている。化学現象を物理法則に基づいて理論的に体系化する学問を理論化学と呼ぶ（高校までで見聞きしているであろう用法とは異なる）。この講義では、その基礎、とりわけ化学現象を量子力学に基づいて考察する「量子化学」分野を中心に解説する。							
【到達目標】							
量子化学について基礎的概念と、それに基づく初歩的な解析手法を修得することを目指す。							
【授業計画と内容】							
教科書やプリントについて、受講者が順番に内容について解説し、それをもとに議論する形式（輪講）で行う。また、これらの理論を実践する計算についても学ぶ。							
1：導入として、理論化学の位置付けと必要性について具体例をあげながら解説する（1回、佐藤）							
2：量子力学の世界を知る。Schrodinger方程式と、その原子や分子などへの応用について学ぶ（佐藤他）							
・量子力学と水素原子（2回）							
・多電子原子（1回）							
・簡単な分子軌道（3回）							
・化学結合の近似的表現と分子構造（2回）							
3：具体的な分子を対象とした計算手法について学ぶ（西本）							
・分子の相対エネルギーや分子軌道の計算を通して具体的な分子を対象とした計算手法について学ぶ（3回）							
・励起エネルギーや遷移状態の計算を通して化学反応への応用を学ぶ（2回）							
4：フィードバック（1回）							
【履修要件】							
特になし							
【成績評価の方法・観点】							
議論への参加の積極性に基づき総合的に評価する。							
----- ILASセミナー：理論化学入門(2)へ続く -----							

ILASセミナー：理論化学入門(2)

[教科書]

ジョージ・ピメンテル(著), R.D.スプレイトレイ(著), 千原 秀昭(翻訳) 『化学結合 その量子論的理解』(東京化学同人) ISBN: 978-4807900992

[参考書等]

(参考書)
授業中に紹介する

[授業外学修(予習・復習)等]

高校までで学んできた基本的な数学について復習しておくことが望ましい。

[その他(オフィスアワー等)]

後半の回でパソコンを用いた演習を行うため、ノートパソコンの持参が必要となる。

[主要授業科目(学部・学科名)]