

都城工業高等専門学校		開講年度	平成29年度 (2017年度)		授業科目	量子化学
科目基礎情報						
科目番号	0090		科目区分	専門 / 選択		
授業形態	授業		単位の種別と単位数	履修単位: 1		
開設学科	物質工学科		対象学年	5		
開設期	前期		週時間数	2		
教科書/教材	「量子物理化学入門」 寺阪利孝, 森聖治著 (三共出版株式会社)					
担当教員	岡部 勇二					
到達目標						
1) 量子力学の発展の歴史を知り、古典力学との相違を認知する。 2) 自由粒子や井戸型ポテンシャルについてシュレーディンガー方程式を解き、波動関数を導き出せる。 3) ヒュッケル分子軌道法を使って簡単な系について分子の物性を評価できる。 4) フロンティア軌道理論を理解し、有機化学反応に適用し、それらの反応性を解釈できる。						
ルーブリック						
	理想的な到達レベルの目安		標準的な到達レベルの目安		未到達レベルの目安(可)	
評価項目1	量子力学の発展の歴史に基づいて、古典力学との相違について正しく説明できる。		量子力学と古典力学の相違について説明できる。		量子力学について説明できる。	
評価項目2	井戸型ポテンシャルについてシュレーディンガー方程式を解き、波動関数を導出し、意味を説明できる。		井戸型ポテンシャルについてシュレーディンガー方程式を解き、波動関数を導き出せる。		井戸型ポテンシャルについてシュレーディンガー方程式を解くことができる。	
評価項目3	ヒュッケル分子軌道法を使ってポリエンのn軌道の波動関数を正しく導出し、特性や反応性について定性的な結論を導くことができる。		ヒュッケル分子軌道法を使ってポリエンのn軌道の波動関数を正しく導出できる。		ヒュッケル近似について説明できる。	
評価項目4	フロンティア軌道理論を理解し、分子軌道法の結果を解釈し、化学反応の機構や反応性について定性的な結論を導くことができる。		フロンティア軌道理論を理解し、分子軌道法の結果を解釈できる。		フロンティア軌道理論について説明できる。	
学科の到達目標項目との関係						
JABEE (c) JABEE (d) JABEE B2						
教育方法等						
概要	量子化学は新しい物理学である量子力学の手法を使って化学現象を理解する学問領域である。量子力学の理論は自然科学のあらゆる分野で立証されており、その手法を原子・分子に関する非常に困難な問題に適用することで、化学現象を理論的に解釈することができる。この量子化学の諸概念を解説し、水素原子の構造に関する常識が量子化学によって明らかとされたことを確認し、その有用性を理解する。また、分子軌道法を適用した応用技術を修得する。					
授業の進め方・方法	1) レポートの提出期限を守ること。					
注意点						
ポートフォリオ						
授業計画						
		週	授業内容		週ごとの到達目標	
前期	1stQ	1週	古典力学から量子論へ		古典力学では説明のつかない自然現象の事例を知り、量子論の成り立ちを理解する。	
		2週	ボーアの水素原子モデル		ボーアの水素原子モデルについて学び、量子の概念を知る。	
		3週	ド・ブロイの物質波		ド・ブロイの物質波の概念を知り、量子の概念を理解する。	
		4週	量子力学の基礎		不確定性原理とシュレーディンガー方程式について知る。	
		5週	自由粒子		自由粒子の運動についてシュレーディンガー方程式を解析的に解く方法を理解する。	
		6週	井戸型ポテンシャル		井戸型ポテンシャルについてシュレーディンガー方程式を解析的に解く方法を理解する。	
		7週	水素原子		水素原子についてシュレーディンガー方程式を解析的に解く過程を概観し、量子数と原子軌道についての理解を深める。	
		8週	多電子原子		有効核電荷や構成原理について学び、多電子原子の構造や特性について理解する。	
	2ndQ	9週	分子の電子構造		分子軌道を原子軌道の線形結合で表現するLCAO法について理解する。	
		10週	分子の電子構造		二原子分子の構造や結合次数について学び、分子の電子構造を理解する。	
		11週	分子軌道法		分子軌道法を概観し、変分法を使って永年方程式を導く。	
		12週	分子軌道法		分子軌道法を概観し、変分法を使って永年方程式を導く。	
		13週	ヒュッケル分子軌道法		n電子系の作る分子軌道の波動関数を定性的に近似できるヒュッケル分子軌道法について説明し、化学反応性の解析法を学ぶ。	
		14週	ヒュッケル分子軌道法		n電子系の作る分子軌道の波動関数を定性的に近似できるヒュッケル分子軌道法について説明し、化学反応性の解析法を学ぶ。	

		15週	フロンティア軌道理論		フロンティア軌道理論を学び、分子軌道の結果から化学反応の機構や反応性を考察する。		
		16週					
モデルコアカリキュラムの学習内容と到達目標							
分類		分野	学習内容	学習内容の到達目標	到達レベル	授業週	
専門的能力	分野別の専門工学	化学・生物系分野	無機化学	主量子数、方位量子数、磁気量子数について説明できる。	4		
				電子殻、電子軌道、電子軌道の形を説明できる。	4		
				パウリの排他原理、軌道のエネルギー準位、フントの規則から電子の配置を示すことができる。	4		
				価電子について理解し、希ガス構造やイオンの生成について説明できる。	4		
				元素の周期律を理解し、典型元素や遷移元素の一般的な性質を説明できる。	4		
				イオン化エネルギー、電子親和力、電気陰性度について説明できる。	4		
		物理化学	ボーアの水素モデルを説明できる。	4			
			1次元波動方程式を解くことができる。	4			
評価割合							
	定期試験	小テスト	レポート	口頭発表	成果品実技	その他	合計
総合評価割合	60	0	40	0	0	0	100
知識の基本的な理解	30	0	30	0	0	0	60
思考・推論・創造への適応力	30	0	10	0	0	0	40
汎用的技能	0	0	0	0	0	0	0
態度・志向性（人間力）	0	0	0	0	0	0	0
総合的な学習経験と創造的思考力	0	0	0	0	0	0	0