

旭川工業高等専門学校		開講年度	平成29年度 (2017年度)		授業科目	基礎量子化学
科目基礎情報						
科目番号	0103		科目区分	専門 / 選択		
授業形態	講義		単位の種別と単位数	学修単位: 2		
開設学科	物質化学工学科		対象学年	5		
開設期	後期		週時間数	後期:2		
教科書/教材	なし					
担当教員	兵野 篤					
到達目標						
1. 量子化学の成り立ちと、その基礎と応用範囲について理解し、説明することができる。 2. 量子化学の基本事項について理解し、説明することができる。 3. 基本的な分子軌道計算について理解し、分子軌道計算を行うことができる。						
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	
評価項目1 (A-2, D-1, D-2)	量子化学の成り立ちと、その基礎と応用範囲について深く理解し、明確に説明することができる。		量子化学の成り立ちと、その基礎と応用範囲について理解し、説明することができる。		量子化学の成り立ちと、その基礎と応用範囲について理解し、説明することができない。	
評価項目2 (A-2, D-1, D-2)	量子化学の基本事項（シュレーディンガー方程式、波動関数、量子数、バンド理論など）について深く理解し、明確に説明することができる。		量子化学の基本事項（シュレーディンガー方程式、波動関数、量子数、バンド理論など）について理解し、説明することができる。		量子化学の基本事項（シュレーディンガー方程式、波動関数、量子数、バンド理論など）について理解し、説明することができない。	
評価項目3 (A-2, D-1, D-2)	基本的な分子軌道計算について深く理解し、分子軌道計算を的確に行うことができる。		基本的な分子軌道計算について理解し、分子軌道計算を行うことができる。		基本的な分子軌道計算について理解し、分子軌道計算を行うことができない。	
学科の到達目標項目との関係						
学習・教育到達度目標 物質化学工学科の教育目標 ② 学習・教育到達度目標 本科の教育目標 ③ JABEE A-2 JABEE D-1 JABEE D-2 JABEE基準 (d)						
教育方法等						
概要	ここまでで学んだ熱力学・反応速度論とともに物理化学の中核をなす、量子化学の基礎理論について学ぶ。					
授業の進め方・方法	量子化学がかかわる現象や学問としての発展の歴史を学ぶことを通じて重要性を理解する。関連する物理知識の復習をした後に、シュレーディンガー方程式等量子化学での基礎知識とその応用方法を学んでいく。適宜、演習や課題等に取り組んで知識の定着を図る。					
注意点	・教育プログラムの学習・教育到達目標の各項目の割合は、A-2(20%)、D-1(50%)、D-2(30%)とする。 ・総時間数90時間（自学自習60時間） ・自学自習時間（60時間）は、日常の授業（30時間）に対する予習復習、レポート課題の解答作成時間、試験のための学習時間を総合したものである。 ・評価については、合計点数が60点以上で単位修得となる。その場合、各到達目標項目の到達レベルが標準以上であること、教育プログラムの学習・教育到達目標の各項目を満たしたことが認められる。					
授業計画						
		週	授業内容		週ごとの到達目標	
後期	3rdQ	1週	量子化学の基礎		量子化学の成り立ちやどのような分野において応用されているかを理解し、説明できる。	
		2週	量子化学の基礎		粒子の波動性、粒子性とそれらが発見されるまでの発展の過程を理解し、説明できる。	
		3週	シュレーディンガー方程式と波動関数		量子力学の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式と波動関数の意味と使い方を理解し、説明できる。	
		4週	1次元の箱の中の粒子		1次元の箱の中の粒子について、シュレーディンガー方程式を解くことでその存在確率を求めることができる。	
		5週	回転運動と角運動量		極座標系での計算を行うために必要な、回転運動と角運動量について、正しく理解し説明することができる。	
		6週	水素様原子 1		もっとも単純な原子モデルである水素様原子モデルについてシュレーディンガー方程式を計算し、電子密度の動径依存性を求めることができる。	
		7週	水素様原子 2 次週、中間テストを行う		もっとも単純な原子モデルである水素様原子モデルについてシュレーディンガー方程式を計算し、電子密度の動径依存性を求めることができる。	
		8週	多電子原子 1		多電子原子モデルにおける計算の複雑さを理解し、近似計算法である独立電子近似と多電子原子モデルにおける計算の複雑さを理解し、近似計算法である独立電子近似と平均場近似について理解し、それらの違いを説明できる。	
	4thQ	9週	多電子原子 2		多電子原子モデルにおける計算の複雑さを理解し、近似計算法である独立電子近似と多電子原子モデルにおける計算の複雑さを理解し、近似計算法である独立電子近似と平均場近似について理解し、それらの違いを説明できる。	
		10週	パウリの排他原理と構成原理		電子配置の構成原理を理解し、化学物質の電子配置を正しく記述することができる。	
		11週	変分法 1		変分法と永年方程式について正しく理解し説明できる。	

		12週	変分法 2	変分法と永年方程式について正しく理解し説明できる。
		13週	水素分子イオンの分子軌道	単純なモデルである水素分子イオンを例に、変分法を用いて分子軌道の計算ができる。
		14週	軌道間相互作用	軌道間相互作用について理解し、説明できる。
		15週	期末テスト	期末テスト
		16週	答案返却・解説	答案返却・解説

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	物理化学	ポ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

	試験	小テスト	レポート	口頭発表	ポートフォリオ	その他	合計
総合評価割合	70	5	15	0	0	10	100
基礎的能力	0	0	0	0	0	0	0
専門的能力	70	5	15	0	0	10	100