

Anan College		Year	2024	Course Title	QuantumChemistry2
Course Information					
Course Code	1495806		Course Category	Specialized / Elective	
Class Format	Lecture		Credits	Academic Credit: 2	
Department	Course of Chemical Engineering		Student Grade	5th	
Term	First Semester		Classes per Week	前期:2	
Textbook and/or Teaching Materials	教科書：真船文隆著「量子化学－基礎からのアプローチ」化学同人，近藤保・真船文隆著「新化学シリーズ 量子化学」裳華房				
Instructor	Yoshida Takehito				
Course Objectives					
<p>1. 等核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位と波動関数を導出することができる。</p> <p>2. 異核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位と波動関数を導出することができる。</p> <p>3. 多原子分子及び固体結晶に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位と波動関数を導出することができる。</p>					
Rubric					
		理想的な到達レベルの目安	標準的な到達レベルの目安	最低限の到達レベルの目安(可)	
評価項目1		等核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位と波動関数を導出することができる。また記号 $\sigma$ , $\pi$ , $g$ , $u$ を用いてMOの分類ができる。簡単な等核2原子分子・イオンの結合次数を算出できる。	等核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位を導出することができる。また記号 $\sigma$ , $\pi$ , $g$ , $u$ を用いてMOの分類ができる。	等核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位の導出の方法を説明できる。	
評価項目2		異核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位と波動関数を導出することができる。	異核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することができる。	異核2原子分子に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位の導出方法を説明できる。	
評価項目3		多原子分子及び固体結晶に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位と状態関数を導出することができる。	多原子分子及び固体結晶に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位を導出することができる。	多原子分子及び固体結晶に原子軌道1次結合-分子軌道 (LCAO-MO) 法を適用することで、エネルギー準位の導出方法を説明できる。	
Assigned Department Objectives					
学習・教育到達度目標 D-1					
Teaching Method					
Outline	本講義は、化学分野の基盤科目である物理化学の中でも、20世紀前半に急速に進化した量子化学について、その基礎を数学的手段を駆使した一貫した理論体系として把握する。次に化学への重要な応用として、分子と固体結晶の電子状態に関して数理的に理解することを学ぶ。具体的問題解法を多く取り入れることで理解力を涵養し、応用化学分野への適応能力を身につける。この科目は企業で、半導体集積素子の設計及び製造プロセスの研究・開発を担当していた教員が、その経験を活かし、多原子分子から固体について量子化学に基づいて講義形式で授業を行うものである。				
Style	授業内容は授業計画を参照すること。基本的に講義形式をとる。板書が主体であるが、関連資料のスライド紹介も取り入れる(特に分子軌道)。学生への発問はするので(3-5回/1コマ)、積極的に答えること。指名されない学生も積極的に考えること。計15回(計約60問)の課題は、自主的に考えて解き問題解法の力を養うこと。				
Notice	5年生前期までの数学・物理・物理化学系科目の知識を前提として活用するので、これらの内容をしっかり復習しておくこと。また授業各回毎に出された課題の実施を含む自学自習が不可欠である。授業時間内に自学自習課題の解説を十分に行うことは不可能なので、疑問点があれば質問に来ること。質問にあたっては、先ず自分で調べ考えてみて、何が理解できなかったのかをはっきりさせてから質問に来ること。 シラバス指定参考書：「アトキンス 基礎物理化学 -分子論的アプローチ- (上)」東京化学同人				
Characteristics of Class / Division in Learning					
<input type="checkbox"/> Active Learning		<input type="checkbox"/> Aided by ICT		<input type="checkbox"/> Applicable to Remote Class	
<input checked="" type="checkbox"/> Instructor Professionally Experienced					
Course Plan					
			Theme	Goals	
1st Semester	1st Quarter	1st	ポルン-オープンハイマー (B-O) 近似	B-O近似による水素分子イオンをモデル図示し、ハミルトニアンを書き下すことができる。	
		2nd	分子軌道 (MO) 法：	原子軌道1次結合 (LCAO) によるMOの構成方法について説明できる。	
		3rd	分子軌道 (MO) 法：水素分子イオン	変分法をB-O近似水素分子イオンハミルトニアンに適用し、重なり積分、クーロン積分、共鳴積分、永年方程式について概略を説明できる。	
		4th	分子軌道 (MO) 法：水素分子イオン	LCAO-MO法を水素分子イオンに適用した際の、波動関数とエネルギー準位を導出することができる。	
		5th	分子軌道 (MO) 法：水素分子イオン	LCAO-MO法を水素分子イオンに適用した際の、クーロン積分について核間距離依存性などを定量的に図示・説明できる。	
		6th	分子軌道 (MO) 法：水素分子イオン	LCAO-MO法を水素分子イオンに適用した際の、共鳴積分について核間距離依存性などを定量的に図示・説明できる。	
		7th	分子軌道 (MO) 法：水素分子イオン	LCAO-MO法による水素分子イオンの、波動関数(結合性、反結合性)形状とエネルギー準位を核間距離の関数として図示することができる。重なり積分、クーロン積分、共鳴積分の挙動も併せて、水素分子イオンについての説明ができる。	
			8th	中間試験	

2nd Quarter	9th	多原子分子：sp混成軌道	LCAO-MO法を用いて、BeH <sub>2</sub> のsp混成軌道を導出することができる。
	10th	多原子分子：sp <sup>2</sup> 混成軌道	LCAO-MO法を用いて、BH <sub>3</sub> のsp <sup>2</sup> 混成軌道を導出することができる。
	11th	多原子分子：sp <sup>3</sup> 混成軌道	LCAO-MO法を用いて、CH <sub>4</sub> のsp <sup>3</sup> 混成軌道を導出することができる。
	12th	多原子分子：ヒュッケル近似	ヒュッケル近似について概要説明できる。エテン分子にヒュッケル近似を適用し、エネルギー準位を導出できる。
	13th	多原子分子：ヒュッケル近似	3ブタジエン分子π電子軌道にヒュッケル近似を適用し、エネルギー準位を導出し波動関数の概形を描ける。
	14th	固体の電子状態	LCAO-MO法を結晶モデルに適用し、エネルギーバンド構造の導出ができる。
	15th	固体の電子状態	フェルミ-ディラック分布を用いた絶縁体・半導体の電子構造について説明できる。バンドの底（有効質量近似）のエネルギー状態密度を計算することができる。
	16th	期末試験答案返却・解答解説	

Evaluation Method and Weight (%)

	定期試験	小テスト	ポートフォリオ	発表・取り組み姿勢	レポート・課題	Total
Subtotal	60	0	0	0	40	100
基礎的能力	20	0	0	0	10	30
専門的能力	30	0	0	0	20	50
分野横断的能力	10	0	0	0	10	20