

|                                                                                                                        |      |                                                                                                                                                                                               |                        |                                                             |                                                                                                        |                                                              |  |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|-------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|--|
| 旭川工業高等専門学校                                                                                                             |      | 開講年度                                                                                                                                                                                          | 令和06年度 (2024年度)        |                                                             | 授業科目                                                                                                   | 基礎量子化学                                                       |  |
| 科目基礎情報                                                                                                                 |      |                                                                                                                                                                                               |                        |                                                             |                                                                                                        |                                                              |  |
| 科目番号                                                                                                                   |      | 0065                                                                                                                                                                                          |                        | 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。<br>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。<br>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                                                                                                                  |      | 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                                                                                                                  |      | 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                                                                                                                  |      | 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                                                                         |      |                                                                                                                                                                                               |                        |                                                             |                                                                                                        |                                                              |  |
| 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                                                                                                                    |      | ・総時間数90時間（自学自習60時間）<br>・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とする。<br>・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。 |                        |                                                             |                                                                                                        |                                                              |  |
| 授業の属性・履修上の区分                                                                                                           |      |                                                                                                                                                                                               |                        |                                                             |                                                                                                        |                                                              |  |
| <input type="checkbox"/> アクティブラーニング                                                                                    |      | <input type="checkbox"/> ICT 利用                                                                                                                                                               |                        | <input type="checkbox"/> 遠隔授業対応                             |                                                                                                        | <input type="checkbox"/> 実務経験のある教員による授業                      |  |
| 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の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<br>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の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1     | 軌道間相互作用について理解し、説明できる。                   |
|  |  | 15週 | 軌道間相互作用2     | 軌道間相互作用について理解し、説明できる。                   |
|  |  | 16週 | 学年末試験        |                                         |

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 |
|----|----|------|-----------|--|--|-------|-----|
|----|----|------|-----------|--|--|-------|-----|

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 | 15   | 15   | 0    | 0       | 0   | 100 |
| 基礎的能力  | 0  | 0    | 0    | 0    | 0       | 0   | 0   |
| 専門的能力  | 70 | 15   | 15   | 0    | 0       | 0   | 100 |