

福島工業高等専門学校		開講年度	平成30年度 (2018年度)		授業科目	量子化学	
科目基礎情報							
科目番号		0131		科目区分		専門 / 選択	
授業形態		講義・演習		単位の種別と単位数		履修単位: 1	
開設学科		物質工学科 (R2年度開講分まで)		対象学年		5	
開設期		後期		週時間数		2	
教科書/教材		量子化学 基礎からのアプローチ、真船文隆、化学同人					
担当教員		若松 孝					
到達目標							
量子化学の基本である波動方程式や波動関数および固有エネルギーなどに関する基本的知識を修得し、電子軌道の観点から原子の電子構造と簡単な構造の分子における化学結合を理解して説明できる。							
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		各授業項目についての基礎的知識を修得し、それらの内容を理解して説明できる。		各授業項目についての基礎的知識を修得し、それらの内容を理解している。		各授業項目についての基礎的知識の修得が不十分で、それらの内容を理解していない。	
学科の到達目標項目との関係							
教育方法等							
概要		分子の形や性質、および簡単な化学反応を理解するためには、電子の波動関数（軌道）やエネルギーに関する知識が必要である。量子力学を用いて簡単な構造の水素原子をはじめとする原子の電子構造、さらに二原子分子における原子間の結合について学ぶ。					
授業の進め方・方法		指定テキストを用いて、主に板書で授業を行う。中間試験を授業時間中に50分間で行い、期末試験は期間内の50分間で実施する。 定期試験70%、課題レポート30%で総合的に評価し、60点以上を合格とする。					
注意点		授業中で指定された問題は、受講前に必ず解いておくこと。微分・積分、行列などの基本的な数学が使えるように、良く数学に復習をすること。					
授業計画							
		週	授業内容		週ごとの到達目標		
後期	3rdQ	1週	ボーアの原子モデル		水素原子の線スペクトル、ボーアの仮説		
		2週	波動性と粒子性 (1)		光の波動性と粒子性、電子の粒子性と波動性		
		3週	波動性と粒子性 (2)		ド・ブロイの式、時間に依存しない波動方程式		
		4週	シュレーディンガー方程式		ハミルトニアン、固有値		
		5週	井戸型ポテンシャル中の自由粒子		固有関数、エネルギー固有値		
		6週	共役ポリエンの光吸収とエネルギー準位		電子軌道、n電子、光吸収		
		7週	量子化学の基礎		波動関数の性質、固有値、期待値、縮重		
		8週	三次元のシュレーディンガー方程式		三次元の井戸型ポテンシャル、波動方程式の極座標表示		
	4thQ	9週	水素原子 (1)		波動関数の動径分布、量子数		
		10週	水素原子 (2)		エネルギー固有値、各電子軌道		
		11週	多電子原子		水素類似原子、パウリの排他律、フントの規則、イオン化エネルギー		
		12週	水素分子イオン		LCAO近似、変分法、結合性軌道と反結合性軌道		
		13週	等核二原子分子 (1)		原子軌道と分子軌道、分子軌道エネルギー		
		14週	等核二原子分子 (2)		電子配置、結合次数		
		15週	異核二原子分子		分子軌道と電子配置、分子の極性		
		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
基礎的能力	自然科学	物理	力学	速度と加速度の概念を説明できる。		3	
				直線および平面運動において、2物体の相対速度、合成速度を求めることができる。		3	
				等加速度直線運動の公式を用いて、物体の座標、時間、速度に関する計算ができる。		3	
				平面内を移動する質点の運動を位置ベクトルの変化として扱うことができる。		3	
				物体の変位、速度、加速度を微分・積分を用いて相互に計算することができる。		3	
				自由落下、及び鉛直投射した物体の座標、速度、時間に関する計算ができる。		3	
				水平投射、及び斜方投射した物体の座標、速度、時間に関する計算ができる。		3	
				物体に作用する力を図示することができる。		3	
				力の合成と分解をすることができる。		3	
				重力、抗力、張力、圧力について説明できる。		3	
				フックの法則を用いて、弾性力の大きさを求めることができる。		3	
				慣性の法則について説明できる。		3	
				作用と反作用の関係について、具体例を挙げて説明できる。		3	
				運動方程式を用いた計算ができる。		3	

				簡単な運動について微分方程式の形で運動方程式を立て、初期値問題として解くことができる。	3	
				静止摩擦力がはたらいっている場合の力のつりあいについて説明できる。	3	
				最大摩擦力に関する計算ができる。	3	
				動摩擦力に関する計算ができる。	3	
				仕事と仕事率に関する計算ができる。	3	
				物体の運動エネルギーに関する計算ができる。	3	
				重力による位置エネルギーに関する計算ができる。	3	
				弾性力による位置エネルギーに関する計算ができる。	3	
				力学的エネルギー保存則を様々な物理量の計算に利用できる。	3	
				物体の質量と速度から運動量を求めることができる。	3	
				運動量の差が力積に等しいことを利用して、様々な物理量の計算ができる。	3	
				運動量保存則を様々な物理量の計算に利用できる。	3	
				周期、振動数など単振動を特徴づける諸量を求めることができる。	3	
				単振動における変位、速度、加速度、力の関係を説明できる。	3	
				等速円運動をする物体の速度、角速度、加速度、向心力に関する計算ができる。	3	
				万有引力の法則から物体間にはたらく万有引力を求めることができる。	3	
				万有引力による位置エネルギーに関する計算ができる。	3	
				力のモーメントを求めることができる。	3	
				角運動量を求めることができる。	3	
				角運動量保存則について具体的な例を挙げて説明できる。	3	
				剛体における力のつり合いに関する計算ができる。	3	
				重心に関する計算ができる。	3	
				一様な棒などの簡単な形状に対する慣性モーメントを求めることができる。	3	
				剛体の回転運動について、回転の運動方程式を立てて解くことができる。	3	
			熱	原子や分子の熱運動と絶対温度との関連について説明できる。	3	
				時間の推移とともに、熱の移動によって熱平衡状態に達することを説明できる。	3	
				物体の熱容量と比熱を用いた計算ができる。	3	
				熱量の保存則を表す式を立て、熱容量や比熱を求めることができる。	3	
				動摩擦力がする仕事は、一般に熱となることを説明できる。	3	
				ボイル・シャルルの法則や理想気体の状態方程式を用いて、気体の圧力、温度、体積に関する計算ができる。	3	
				気体の内部エネルギーについて説明できる。	3	
				熱力学第一法則と定積変化・定圧変化・等温変化・断熱変化について説明できる。	3	
				エネルギーには多くの形態があり互に変換できることを具体例を挙げて説明できる。	3	
				不可逆変化について理解し、具体例を挙げることができる。	3	
			熱機関の熱効率に関する計算ができる。	3		
			波動	波の振幅、波長、周期、振動数、速さについて説明できる。	3	
				横波と縦波の違いについて説明できる。	3	
				波の重ね合わせの原理について説明できる。	3	
				波の独立性について説明できる。	3	
				2つの波が干渉するとき、互いに強めあう条件と弱めあう条件について計算できる。	3	
				定常波の特徴(節、腹の振動のようすなど)を説明できる。	3	
				ホイヘンスの原理について説明できる。	3	
				波の反射の法則、屈折の法則、および回折について説明できる。	3	
				弦の長さや弦を伝わる波の速さから、弦の固有振動数を求めることができる。	3	
				気柱の長さや音速から、開管、閉管の固有振動数を求めることができる(開口端補正は考えない)。	3	
				共振、共鳴現象について具体例を挙げることができる。	3	
				一直線上の運動において、ドップラー効果による音の振動数変化を求めることができる。	3	
				自然光と偏光の違いについて説明できる。	3	
				光の反射角、屈折角に関する計算ができる。	3	
				波長の違いによる分散現象によってスペクトルが生じることを説明できる。	3	
				電気	導体と不導体の違いについて、自由電子と関連させて説明できる。	3

専門的能力	分野別の専門工学	物理実験		オームの法則から、電圧、電流、抵抗に関する計算ができる。	3	
				抵抗を直列接続、及び並列接続したときの合成抵抗の値を求めることができる。	3	
				ジュール熱や電力を求めることができる。	3	
			物理実験	測定機器などの取り扱い方を理解し、基本的な操作を行うことができる。	3	
				安全を確保して、実験を行うことができる。	3	
				実験報告書を決められた形式で作成できる。	3	
				有効数字を考慮して、データを集計することができる。	3	
				力学に関する分野に関する実験に基づき、代表的な物理現象を説明できる。	3	
				熱に関する分野に関する実験に基づき、代表的な物理現象を説明できる。	3	
				波に関する分野に関する実験に基づき、代表的な物理現象を説明できる。	3	
				光に関する分野に関する実験に基づき、代表的な物理現象を説明できる。	3	
				電磁気に関する分野に関する実験に基づき、代表的な物理現象を説明できる。	3	
				電子・原子に関する分野に関する実験に基づき、代表的な物理現象を説明できる。	3	
		化学・生物系分野	有機化学	有機物が炭素骨格を持つ化合物であることを説明できる。	4	
				代表的な官能基を有する化合物を含み、IUPACの命名法に基づき、構造から名前、名前から構造の変換ができる。	4	
				σ 結合と n 結合について説明できる。	4	
				混成軌道を用い物質の形を説明できる。	4	
				誘起効果と共鳴効果を理解し、結合の分極を予測できる。	4	
				σ 結合と n 結合の違いを分子軌道を使い説明できる。	4	
				ルイス構造を書くことができ、それを利用して反応に結びつけることができる。	4	
				共鳴構造について説明できる。	4	
				炭化水素の種類と、それらに関する性質および代表的な反応を説明できる。	4	
				芳香族性についてヒュッケル則に基づき説明できる。	4	
				分子の三次元的な構造がイメージでき、異性体について説明できる。	4	
				構造異性体、シーストランス異性体、鏡像異性体などを説明できる。	4	
				化合物の立体化学に関して、その表記法により正しく表示できる。	4	
				代表的な官能基に関して、その構造および性質を説明できる。	4	
				それらの官能基を含む化合物の合成法およびその反応を説明できる。	4	
				代表的な反応に関して、その反応機構を説明できる。	4	
				高分子化合物がどのようなものか説明できる。	4	
				代表的な高分子化合物の種類と、その性質について説明できる。	4	
				高分子の分子量、一次構造から高次構造、および構造から発現する性質を説明できる。	4	
				高分子の熱的性質を説明できる。	4	
				重合反応について説明できる。	4	
				重縮合・付加重合・重付加・開環重合などの代表的な高分子合成反応を説明でき、どのような高分子がこの反応によりできているか区別できる。	4	
				ラジカル重合・カチオン重合・アニオン重合の反応を説明できる。	4	
				ラジカル重合・カチオン重合・アニオン重合の特徴を説明できる。	4	
			無機化学	電子論に立脚し、構造と反応性の関係が予測できる。	4	
				反応機構に基づき、生成物が予測できる。	4	
				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	
				イオン結合と共有結合について説明できる。	4	
				基本的な化学結合の表し方として、電子配置をルイス構造で示すことができる。	4	

				金属結合の形成について理解できる。	4		
				代表的な分子に関して、原子価結合法(VB法)や分子軌道法(MO法)から共有結合を説明できる。	4		
				電子配置から混成軌道の形成について説明することができる。	4		
				結晶の充填構造・充填率・イオン半径比など基本的な計算ができる。	4		
				配位結合の形成について説明できる。	4		
				水素結合について説明できる。	4		
				錯体化学で使用される用語(中心原子、配位子、キレート、配位数など)を説明できる。	4		
				錯体の命名法の基本を説明できる。	4		
				配位数と構造について説明できる。	4		
				代表的な錯体の性質(色、磁性等)を説明できる。	4		
				代表的な元素の単体と化合物の性質を説明できる。	4		
			分析化学	いくつかの代表的な陽イオンや陰イオンの定性分析のための化学反応について理解できる。	4		
				電離平衡と活量について理解し、物質量に関する計算ができる。	4		
				溶解度・溶解度積について理解し必要な計算ができる。	4		
				沈殿による物質の分離方法について理解し、化学量論から沈殿量の計算ができる。	4		
				強酸、強塩基および弱酸、弱塩基についての各種平衡について説明できる。	4		
				強酸、強塩基、弱酸、弱塩基、弱酸の塩、弱塩基の塩のpHの計算ができる。	4		
				緩衝溶液とpHの関係について説明できる。	4		
				錯体の生成について説明できる。	4		
				陽イオンや陰イオンの関係した化学反応について理解し、溶液中の物質の濃度計算(定量計算)ができる。	4		
				中和滴定についての原理を理解し、酸及び塩基濃度の計算ができる。	4		
				酸化還元滴定についての原理を理解し、酸化剤及び還元剤の濃度計算ができる。	4		
				キレート滴定についての原理を理解し、金属イオンの濃度計算ができる。	4		
				光吸収について理解し、代表的な分析方法について説明できる。	4		
				Lambert-Beerの法則に基づく計算をすることができる。	4		
				イオン交換による分離方法についての概略を説明できる。	4		
				溶媒抽出を利用した分析法について説明できる。	4		
				無機および有機物に関する代表的な構造分析、定性、定量分析法等を理解している。	4		
				クロマトグラフィーの理論と代表的な分析方法を理解している。	4		
				特定の分析装置を用いた気体、液体、固体の分析方法を理解し、測定例をもとにデータ解析することができる。	4		
				物理化学	放射線の種類と性質を説明できる。	4	
					放射性元素の半減期と安定性を説明できる。	4	
			年代測定の例として、C14による時代考証ができる。		4		
			核分裂と核融合のエネルギー利用を説明できる。		4		
			気体の法則を理解して、理想気体の方程式を説明できる。		4		
			気体の分子速度論から、圧力を定義して、理想気体の方程式を証明できる。		4		
			実在気体の特徴と状態方程式を説明できる。		4		
			臨界現象と臨界点近傍の特徴を説明できる。		4		
			混合気体の分圧の計算ができる。		4		
			純物質の状態図(P-V、P-T)を理解して、蒸気圧曲線を説明できる。		4		
			2成分の状態図(P-x、y、T-x、y)を理解して、気液平衡を説明できる。		4		
			束一的性質を説明できる。		4		
			蒸気圧降下、沸点上昇より、溶質の分子量を計算できる。		4		
			凝固点降下と浸透圧より、溶質の分子量を計算できる。		4		
			相律の定義を理解して、純物質、混合物の自由度(温度、圧力、組成)を計算し、平衡状態を説明できる。		4		
			熱力学の第一法則の定義と適用方法を説明できる。		4		
			エンタルピーの定義と適用方法を説明できる。		4		
			化合物の標準生成エンタルピーを計算できる。		4		
			エンタルピーの温度依存性を計算できる。		4		
			内部エネルギー、熱容量の定義と適用方法を説明できる。		4		
			平衡の記述(質量作用の法則)を説明できる。		4		
			諸条件の影響(ルシャトリエの法則)を説明できる。	4			

				均一および不均一反応の平衡を説明できる。	4	
				熱力学の第二・第三法則の定義と適用方法を説明できる。	4	
				純物質の絶対エントロピーを計算できる。	4	
				化学反応でのエントロピー変化を計算できる。	4	
				化合物の標準生成自由エネルギーを計算できる。	4	
				反応における自由エネルギー変化より、平衡定数・組成を計算できる。	4	
				平衡定数の温度依存性を計算できる。	4	
				気体の等温、定圧、定容および断熱変化のdU、W、Qを計算できる。	4	
				反応速度の定義を理解して、実験的決定方法を説明できる。	4	
				反応速度定数、反応次数の概念を理解して、計算により求めることができる。	4	
				微分式と積分式が相互に変換できて半減期が求められる。	4	
				連続反応、可逆反応、併発反応等を理解している。	4	
				律速段階近似、定常状態近似等を理解し、応用できる。	4	
				電池反応と電気分解を理解し、実用例を説明できる。	4	
			化学工学	SI単位への単位換算ができる。	4	
				物質の流れと物質収支についての計算ができる。	4	
				化学反応を伴う場合と伴わない場合のプロセスの物質収支の計算ができる。	4	
				管径と流速・流量・レイノルズ数の計算ができ、流れの状態(層流・乱流)の判断ができる。	4	
				流れの物質収支の計算ができる。	4	
				流れのエネルギー収支やエネルギー損失の計算ができる。	4	
				流体輸送の動力の計算ができる。	4	
				蒸留の原理について理解できる。	4	
				単蒸留、精留・蒸留装置について理解できる。	4	
				蒸留についての計算ができる(ラウールの法則、マッケーブシーリング法等)。	4	
				基本的な抽出の目的や方法を理解し、抽出率など関係する計算ができる。	4	
				吸着や膜分離の原理・目的・方法を理解できる。	4	
				バッチ式と連続式反応装置について特徴や用途を理解できる。	4	
			基礎生物	原核生物と真核生物の違いについて説明できる。	4	
				核、ミトコンドリア、葉緑体、細胞膜、細胞壁、液胞の構造と働きについて説明できる。	4	
				葉緑体とミトコンドリアの進化の説について説明できる。	4	
				代謝、異化、同化という語を理解しており、生命活動のエネルギーの通貨としてのATPの役割について説明できる。	4	
				酵素とは何か説明でき、代謝における酵素の役割を説明できる。	4	
				光合成及び呼吸の大まかな過程を説明でき、2つの過程の関係を説明できる。	4	
				DNAの構造について遺伝情報と結びつけて説明できる。	4	
				遺伝情報とタンパク質の関係について説明できる。	4	
				染色体の構造と遺伝情報の分配について説明できる。	4	
				細胞周期について説明できる。	4	
				分化について説明できる。	4	
				ゲノムと遺伝子の関係について説明できる。	4	
				細胞膜を通しての物質輸送による細胞の恒常性について説明できる。	4	
				フィードバック制御による体内の恒常性の仕組みを説明できる。	4	
				情報伝達物質とその受容体の働きを説明できる。	4	
				免疫系による生体防御のしくみを説明できる。	4	
			生物化学	タンパク質、核酸、多糖がそれぞれモノマーによって構成されていることを説明できる。	4	
				生体物質にとって重要な弱い化学結合(水素結合、イオン結合、疎水性相互作用など)を説明できる。	4	
				単糖と多糖の生物機能を説明できる。	4	
				単糖の化学構造を説明でき、各種の異性体について説明できる。	4	
				グリコシド結合を説明できる。	4	
				多糖の例を説明できる。	4	
				脂質の機能を複数あげることができる。	4	
				トリアシルグリセロールの構造を説明できる。脂肪酸の構造を説明できる。	4	
				リン脂質が作るミセル、脂質二重層について説明でき、生体膜の化学的性質を説明できる。	4	
				タンパク質の機能をあげることができ、タンパク質が生命活動の中心であることを説明できる。	4	

				タンパク質を構成するアミノ酸をあげ、それらの側鎖の特徴を説明できる。	4	
				アミノ酸の構造とペプチド結合の形成について構造式を用いて説明できる。	4	
				タンパク質の高次構造について説明できる。	4	
				ヌクレオチドの構造を説明できる。	4	
				DNAの二重らせん構造、塩基の相補的結合を説明できる。	4	
				DNAの半保存的複製を説明できる。	4	
				RNAの種類と働きを列記できる。	4	
				コドンについて説明でき、転写と翻訳の概要を説明できる。	4	
				酵素の構造と酵素-基質複合体について説明できる。	4	
				酵素の性質(基質特異性、最適温度、最適pH、基質濃度)について説明できる。	4	
				補酵素や補欠因子の働きを例示できる。水溶性ビタミンとの関係を説明できる。	4	
				解糖系の概要を説明できる。	4	
				クエン酸回路の概要を説明できる。	4	
				酸化的リン酸化過程におけるATPの合成を説明できる。	4	
				嫌気呼吸(アルコール発酵・乳酸発酵)の過程を説明できる。	4	
				各種の光合成色素の働きを説明できる。	4	
				光化学反応の仕組みを理解し、その概要を説明できる。	4	
				炭酸固定の過程を説明できる。	4	
		生物工学		原核微生物の種類と特徴について説明できる。	4	
				真核微生物(カビ、酵母)の種類と特徴について説明できる。	4	
				微生物の増殖(増殖曲線)について説明できる。	4	
				微生物の育種方法について説明できる。	4	
				微生物の培養方法について説明でき、安全対策についても説明できる。	4	
				アルコール発酵について説明でき、その醸造への利用について説明できる。	4	
				食品加工と微生物の関係について説明できる。	4	
				抗生物質や生理活性物質の例を挙げ、微生物を用いたそれらの生産方法について説明できる。	4	
				微生物を用いた廃水処理・バイオレメディエーションについて説明できる。	4	
	分野別の工学実験・実習能力	化学・生物系分野【実験・実習能力】	有機化学実験	加熱還流による反応ができる。	4	
				蒸留による精製ができる。	4	
				吸引ろ過ができる。	4	
				再結晶による精製ができる。	4	
				分液漏斗による抽出ができる。	4	
				薄層クロマトグラフィによる反応の追跡ができる。	4	
				融点または沸点から生成物の確認と純度の検討ができる。	4	
				収率の計算ができる。	4	
			分析化学実験	中和滴定法を理解し、酸あるいは塩基の濃度計算ができる。	4	
				酸化還元滴定法を理解し、酸化剤あるいは還元剤の濃度計算ができる。	4	
				キレート滴定を理解し、錯体の濃度の計算ができる。	4	
				陽イオンおよび陰イオンのいずれかについて、分離のための定性分析ができる。	4	
				代表的な定性・定量分析装置としてクロマト分析(特にガスクロ、液クロ)や、物質の構造決定を目的とした機器(吸光光度法、X線回折、NMR等)、形態観察装置としての電子顕微鏡の中の代表的ないずれかについて、その原理を理解し、測定からデータ解析までの基本的なプロセスを行うことができる。	4	
				固体、液体、気体の定性・定量・構造解析・組成分析等に関して必要な特定の分析装置に関して測定条件を選定し、得られたデータから考察をすることができる。	4	
			物理化学実験	温度、圧力、容積、質量等を例にとり、測定誤差(個人差・器差)、実験精度、再現性、信頼性、有効数字の概念を説明できる。	4	
				各種密度計(ゲールサック、オストワルド等)を用いて、液体および固体の正確な密度を測定し、測定原理を説明できる。	4	
				粘度計を用いて、各種液体・溶液の粘度を測定し、濃度依存性を説明できる。	4	
				熱に関する測定(溶解熱、燃焼熱等)をして、定量的に説明できる。	4	
				分子量の測定(浸透圧、沸点上昇、凝固点降下、粘度測定法等)により、束一的性質から分子量を求めることができる。	4	
				相平衡(液体の蒸気圧、固体の溶解度、液体の相互溶解度等)を理解して、平衡の概念を説明できる。	4	
				基本的な金属半極電位(半電池)を組み合わせて、代表的なダニエル電池の起電力を測定できる。また、水の電気分解を測定し、理論分解電圧と水素・酸素過電圧についても説明できる。	4	

		生物工学実験		反応速度定数の温度依存性から活性化エネルギーを決定できる。	4	
				光学顕微鏡を取り扱うことができ、生物試料を顕微鏡下で観察することができる。	4	
				滅菌・無菌操作をして、微生物を培養することができる。	4	
				適切な方法や溶媒を用いて、生物試料から目的の生体物質を抽出し、ろ過や遠心分離等の簡単な精製ができる。	4	
				分光分析法を用いて、生体物質を定量することができる。	4	
				クロマトグラフィー法または電気泳動法によって生体物質を分離することができる。	4	
				酵素の活性を定量的または定性的に調べることができる。	4	

評価割合							
	試験	課題	相互評価	態度	ポートフォリオ	その他	合計
総合評価割合	70	30	0	0	0	0	100
基礎的能力	0	0	0	0	0	0	0
専門的能力	70	30	0	0	0	0	100
分野横断的能力	0	0	0	0	0	0	0