

茨城工業高等専門学校		開講年度	平成30年度 (2018年度)		授業科目	反応理論化学	
科目基礎情報							
科目番号	0044		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II: 2		
開設学科	物質工学科(2016年度以前入学生)		対象学年		5		
開設期	前期		週時間数		前期:2		
教科書/教材	辻 和秀 「これから始める量子化学―物理・数学のキホンからよくわかる!」 (オーム社)						
担当教員	佐藤 稔						
到達目標							
1. 量子論的な考え方ができること。 2. フロンティア軌道法をもとに化学反応を予想したり、説明したりできること。							
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	
		量子論とは何かをわかりやすく説明できる。		量子論とは何かを説明できる。		量子論とは何かを説明できない。	
		フロンティア軌道法をもとに化学反応を予想したり、わかりやすく説明したりできる。		フロンティア軌道法をもとに化学反応を予想したり、説明したりできる。		フロンティア軌道法をもとに化学反応を予想したり、説明したりできない。	
学科の到達目標項目との関係							
学習・教育到達度目標 (A)(イ) 学習・教育到達度目標 (B)(ロ)							
教育方法等							
概要		量子化学的な概念を学び、フロンティア軌道法を基に化学反応（特に有機化学反応）を理論的に解釈できるようにする。					
授業の進め方・方法		プリントを用いて講義を行い、小テストにより理解度を確認する。					
注意点		小テストを行うので講義中に理解し、質問があればその場で聞くこと。講義ノートの内容を見直し、講義に係る例題・演習問題を解いておくこと。次回予定の部分を予習しておくこと。また、微分積分を復習すること。電卓の使用可。					
授業計画							
		週	授業内容		週ごとの到達目標		
前期	1stQ	1週	量子化学の誕生と光の二重性		量子化学誕生の経緯、光の波動性と粒子性を説明できる。		
		2週	Bohrの原子モデルとドブロイ波		Bohrの原子モデル、電子の波動性と粒子性、不確定性原理を説明できる。		
		3週	シュレーディンガーの波動方程式(1)		シュレーディンガーの波動方程式、波動関数の意味を説明できる。		
		4週	シュレーディンガーの波動方程式(2)		一次元の井戸型ポテンシャル、電子の存在確率を説明できる。		
		5週	シュレーディンガーの波動方程式(3)		期待値、Bohrの理論と量子論の違いを説明できる。		
		6週	フントの規則、パウリの排他原理		フントの規則、パウリの排他原理を説明できる。		
		7週	(中間試験)				
		8週	分子軌道法		結合性軌道と反結合性軌道を説明できる。		
	2ndQ	9週	フロンティア分子軌道		フロンティア分子軌道論、フロンティア電子密度、n電子密度と結合次数を説明できる。		
		10週	軌道の相互作用		軌道の対称性と軌道の相互作用、軌道のエネルギー準位と軌道の相互作用を説明できる。		
		11週	ヒュッケル分子軌道法		ヒュッケル分子軌道法によるエネルギーや波動関数の計算できる。		
		12週	軌道の相互作用の原理		軌道の相互作用条件、酸素と窒素の分子軌道の違いを説明できる。		
		13週	HOMO軌道とLUMO軌道		HOMO軌道とLUMO軌道の相互作用を説明できる。		
		14週	軌道の対称性と立体選択		Diels-Alder反応、環化反応、開環反応を説明できる。		
		15週	(期末試験)				
		16週	総復習		前期の内容を復習する。		
評価割合							
	試験	小テスト	相互評価	態度	ポートフォリオ	その他	合計
総合評価割合	80	20	0	0	0	0	100
基礎的能力	0	0	0	0	0	0	0
専門的能力	80	20	0	0	0	0	100
分野横断的能力	0	0	0	0	0	0	0