

東京工業高等専門学校		開講年度	平成28年度 (2016年度)		授業科目	量子化学	
科目基礎情報							
科目番号		0023		科目区分		専門 / 必修	
授業形態		授業		単位の種別と単位数		履修単位: 1	
開設学科		物質工学科		対象学年		4	
開設期		後期		週時間数		2	
教科書/教材		平尾公彦, 武次徹也編, 量子化学計算ビキナーズマニュアル, 講談社サイエンティフィク					
担当教員		城石 英伸					
到達目標							
分子への量子論の応用について理解できたかどうか定期試験により評価する。							
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		シュレーディンガー方程式を用いて, 応用的な計算ができる		シュレーディンガー方程式を用いて, 基礎的な計算ができる		シュレーディンガー方程式を用いて計算ができない	
評価項目2		変分法を用いて応用的計算ができる		変分法を用いて計算ができる		変分法を用いて計算ができない	
評価項目3		量子化学計算ソフトを用いて任意の分子の量子科学計算が正しくできる		量子化学計算ソフトを用いて簡単な分子の計算ができる		量子化学計算ソフトを用いて計算できない	
学科の到達目標項目との関係							
教育方法等							
概要		本講では変分法等の量子化学計算法を学習しエチレンやベンゼン等の簡単な分子について計算できるようにする。また, 量子化学は, 量子論を様々な分子に適用し, その電子状態について検討する学問である。そのために本講では実際に量子化学計算ソフトを使い, 量子化学計算を実際に役立つようにするにはどうすればよいのかを学習する。					
授業の進め方・方法		講義と演習を組み合わせで学習していく。					
注意点		量子論Ⅰ、Ⅱを復習しておくこと。授業の予習・復習及び演習については自学自習により取り組み学修すること。					
授業計画							
		週	授業内容		週ごとの到達目標		
後期	3rdQ	1週	数学の復習および分子の形		左記内容を理解する		
		2週	数式処理ソフトMaximaの復習		同上		
		3週	シュレーディンガー方程式を導く, 数值的に解く(1)		同上		
		4週	シュレーディンガー方程式を導く, 数值的に解く(2)		同上		
		5週	水素様原子・多電子原子 変分法・水素分子イオンの分子軌道		同上		
		6週	エチレン, ベンゼン等の分子軌道		同上		
		7週	分子モデリングとは・分子科学計算の種類		同上		
		8週	量子力学計算フロントエンドWinMostar入門 エネルギー準位図と分子軌道の表示		同上		
	4thQ	9週	複雑な分子のモデリング 分子の対称性と点群		同上		
		10週	回転ポテンシャルの計算 SN2反応の解析・ラジカル・励起状態の計算		同上		
		11週	非経験的分子軌道法による量子化学計算		同上		
		12週	量子化学計算フロントエンドFacio入門		同上		
		13週	溶媒中の分子を量子化学計算するには - firefly編		同上		
		14週	期末試験		期末試験で合格点を取る		
		15週	期末試験内容の解説		左記内容を理解する		
		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
専門的能力	分野別の専門工学	化学・生物系分野	無機化学	主量子数、方位量子数、磁気量子数について説明できる。		3	
				電子殻、電子軌道、電子軌道の形を説明できる。		3	
				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。		3	
		物理化学	化合物の標準生成エンタルピーを計算できる。		3		
			エンタルピーの温度依存性を計算できる。		3		
			内部エネルギー、熱容量の定義と適用方法を説明できる。		3		
			1次元波動方程式を解くことができる。		3		
評価割合							
	試験	レポート	相互評価	態度	ポートフォリオ	その他	合計
総合評価割合	50	50	0	0	0	0	100
基礎的能力	0	0	0	0	0	0	0
専門的能力	50	50	0	0	0	0	100
分野横断的能力	0	0	0	0	0	0	0