

奈良工業高等専門学校		開講年度	令和02年度 (2020年度)		授業科目	基礎量子化学	
科目基礎情報							
科目番号		0072		科目区分		専門 / 必修	
授業形態		講義		単位の種別と単位数		履修単位: 2	
開設学科		物質化学工学科		対象学年		4	
開設期		通年		週時間数		2	
教科書/教材		アトキンス物理化学（上）（下） 千原、中村 東京化学同人					
担当教員		松浦 幸仁					
到達目標							
1. 量子論の概念と原子軌道が理解できる。							
2. 化学結合と分子軌道が理解できる。							
3. 分光学の基礎が理解できる。							
4. 統計熱力学の基礎が理解できる。							
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		並進運動のシュレディンガー方程式を解くことができる。		量子力学の基本原理が説明できる。		量子力学の成立過程が判らない。	
評価項目2		水素型原子のシュレディンガー方程式の解が説明できる。		振動・回転運動の量子化が説明できる。		量子化とは何かわからない。	
評価項目3		分子軌道法が説明できる。		2原子分子の電子状態と結合が説明できる。		共有結合とは何かわからない。	
評価項目4		電子遷移が説明できる。		振動・回転スペクトルが説明できる。		NMR、ESRの原理が説明できない。	
学科の到達目標項目との関係							
準学士課程（本科1～5年）学習教育目標（2）							
教育方法等							
概要		物性を理解するためには量子力学・統計熱力学の知識が不可欠である。本講義では、量子力学で記述される電子・原子のふるまいを学習した後に、それらの原理を応用した分光学について習得する。 ※実務との関係 量子化学は、電子材料や化学薬品などに使われる材料の分子設計を行う際に用いられるコンピュータシミュレーションには不可欠な知識である。 当該授業では、量子化学の基礎に加えて、コンピュータシミュレーションによる分子設計について企業で行われている具体的な例を交えて講義を行い、その知識を深める。					
授業の進め方・方法		講義が主体の授業を行う。					
注意点		関連科目 無機化学Ⅰ、Ⅱ 学習指針 シュレディンガー方程式の解法などは図書館で演習書などを参考にして自分で解く。 自己学習 低学年で習った微積分、代数幾何、古典力学などを見直しておく。					
学修単位の履修上の注意							
アトキンス物理化学をよく読むこと。							
授業計画							
		週	授業内容		週ごとの到達目標		
前期	1stQ	1週	量子論：序論と原理		量子力学の起源		
		2週	同上		シュレディンガー方程式		
		3週	同上		波動関数とボルンの解釈		
		4週	同上		量子力学的原理		
		5週	同上		同上		
		6週	同上		並進運動		
		7週	前期末試験		試験		
		8週	テスト返却		復習		
	2ndQ	9週	量子論：手法と応用		振動運動		
		10週	同上、以下同文		回転運動		
		11週	同上		スピン		
		12週	原子構造と原子スペクトル		水素型原子の構造		
		13週	同上		原子軌道関数		
		14週	同上		原子軌道関数のエネルギー		
		15週	前期末試験		試験		
		16週	テスト返却		復習		
後期	3rdQ	1週	原子構造と原子スペクトル		多電子原子の構造		
		2週	同上		複雑な原子のスペクトル		
		3週	分子構造		ボルンオッペンハイマー近似		
		4週	同上、以下同文		分子軌道法：水素分子イオン		
		5週	同上		分子軌道法：等核二原子分子		
		6週	同上		分子軌道法：変分原理		

		7週	後期中間試験	試験
		8週	テスト返却	復習
	4thQ	9週	分子の対称	対称要素
		10週	同上	群論
		11週	同上	指標表
		12週	同上	対称性の応用
		13週	分子分光	回転スペクトル、振動スペクトル
		14週	同上	電子遷移、磁気共鳴
		15週	学年末試験	試験
		16週	テスト返却	復習

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	発表	相互評価	態度	ポートフォリオ	その他	合計
総合評価割合	100	0	0	0	0	0	100
基礎的能力	30	0	0	0	0	0	30
専門的能力	30	0	0	0	0	0	30
分野横断的能力	40	0	0	0	0	0	40