

和歌山工業高等専門学校		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	0045			科目区分	専門 / 選択			
授業形態	授業			単位の種別と単位数	学修単位: 1			
開設学科	物質工学科 (物質工学コース)			対象学年	5			
開設期	前期			週時間数	1			
教科書/教材	基礎量子化学 (友田修司著) 東京大学出版会							
担当教員	森 一							
到達目標								
1. 有機化合物の化学反応について、軌道論による考察手法が理解できること。 2. 分子軌道法に基づく計算手法とその応用例が理解できること。								
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		
有機化合物の化学反応	軌道論による考察手法の理解ができる			軌道論による考察手法の理解がある程度できる		軌道論が理解できていない		
分子軌道法に基づく計算手法	計算手法と応用例を説明できる			計算手法と応用例がある程度説明できる		計算手法と応用例が理解できない		
学科の到達目標項目との関係								
教育方法等								
概要	量子化学は物質の特徴を原子、電子レベルから解釈する根幹の学問であることから、現代化学の発展においてますます重要な学問分野になってきている。特にコンピュータの演算性能の向上により、量子化学理論に基づく計算が精密に行えるようになり、研究開発現場での量子化学計算の重要性が益々増してきている。本講では、量子化学の基礎と量子化学理論に基づく有機反応の考え方について学習する。							
授業の進め方・方法	1. すでに学習した原子軌道、分子軌道の考え方をもとに、有機化合物の化学結合について軌道論の観点から学ぶ。 2. フロンティア軌道論などに基づき、実際の有機反応が軌道論からどのように解釈できるかについて学ぶ。 3. 量子化学計算の手法とその実例について学ぶ。							
注意点								
授業計画								
前期	1stQ	週	授業内容			週ごとの到達目標		
		1週	量子論からシュレディンガー方程式へ			量子論の考え方およびシュレディンガー方程式の導出について概説し、量子化学の基礎的考え方について学習する。		
		2週	原子軌道と分子軌道			原子軌道についての考え方および原子軌道から分子軌道の作成の仕方について学習する。		
		3週	分子軌道論			化学結合について、分子軌道的考え方に基づく軌道相互作用の法則について学習する。		
		4週	フロンティア軌道論の基礎			フロンティア軌道理論について、基礎となる理論や考え方について学習する。		
		5週	フロンティア軌道論による化学反応の考察 1			フロンティア軌道理論を利用した有機合成反応の位置選択性の解釈の方法について学習する。		
		6週	フロンティア軌道論による化学反応の考察 2			フロンティア軌道理論を利用した有機合成反応の閉環、開環反応の立体選択性などについて学習する。		
		7週	量子化学計算の基礎			量子化学計算の種類や特徴に加え、実際の計算手法について学習する。		
	8週	量子化学計算の実例			量子化学計算の結果の解釈について、実例も交えながら学習する。			
	2ndQ	9週						
		10週						
		11週						
		12週						
		13週						
		14週						
		15週						
		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	
評価割合								
	試験			演習レポート		合計		
総合評価割合	60			40		100		
基礎的能力	30			20		50		
専門的能力	30			20		50		