

|                                                                          |                                                                                                                                                                                         |      |                       |                       |                                                      |                 |     |
|--------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|-----------------------|-----------------------|------------------------------------------------------|-----------------|-----|
| 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。<br>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。<br>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。<br>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                                                                     |                                                                                                                                                                                         |      |                       |                       |                                                      |                 |     |
|                                                                          |                                                                                                                                                                                         | 週    | 授業内容                  |                       | 週ごとの到達目標                                             |                 |     |
| 前期                                                                       | 1stQ                                                                                                                                                                                    | 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                                                   |                 |     |