

|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|---------------------------------------------------|-----------|-----------------------------------|--------|-----|
| 北九州工業高等専門学校                                                                                                                                                        |                                                                                                                          | 開講年度 | 平成29年度 (2017年度)                                   |           | 授業科目                              | 量子物理化学 |     |
| 科目基礎情報                                                                                                                                                             |                                                                                                                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 科目番号                                                                                                                                                               | 0079                                                                                                                     |      |                                                   | 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: 2                           |        |     |
| 開設学科                                                                                                                                                               | 生産デザイン工学専攻                                                                                                               |      |                                                   | 対象学年      | 専2                                |        |     |
| 開設期                                                                                                                                                                | 前期                                                                                                                       |      |                                                   | 週時間数      | 2                                 |        |     |
| 教科書/教材                                                                                                                                                             | 【教科書】「量子化学 - 基礎からのアプローチ」, 化学同人, 真船文隆 著, 【参考書】「量子化学入門(上)」, 化学同人, 米沢貞治郎他著, 「初等量子化学」, 化学同人, 大岩正芳 著                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 担当教員                                                                                                                                                               | 松嶋 茂憲                                                                                                                    |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 到達目標                                                                                                                                                               |                                                                                                                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 1. 1次元波動方程式を解くことができる。<br>2. 水素原子に関する線形軌道と波動関数の関係を理解することができる。<br>3. 多電子原子の電子配置と周期律を理解することができる。<br>4. 重なり積分、クーロン積分、共鳴積分を理解することができる。<br>5. 量子化学に基づいて分子の運動を理解することができる。 |                                                                                                                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 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                                                                                                                                                              | 1次元波動方程式を解くことができ、応用できる。                                                                                                  |      | 1次元波動方程式を解くことができる。                                |           | 1次元波動方程式を解くことができない。               |        |     |
| 評価項目2                                                                                                                                                              | 水素原子に関する線形軌道と波動関数の関係を理解することができ、応用できる。                                                                                    |      | 水素原子に関する線形軌道と波動関数の関係を理解することができる。                  |           | 水素原子に関する線形軌道と波動関数の関係を理解することができない。 |        |     |
| 評価項目3                                                                                                                                                              | 多電子原子の電子配置と周期律を理解することができ、応用できる。                                                                                          |      | 多電子原子の電子配置と周期律を理解することができる。                        |           | 多電子原子の電子配置と周期律を理解することができない。       |        |     |
| 評価項目4                                                                                                                                                              | 重なり積分、クーロン積分、共鳴積分を理解することができ、応用できる。                                                                                       |      | 重なり積分、クーロン積分、共鳴積分を理解することができる。                     |           | 重なり積分、クーロン積分、共鳴積分を理解することができない。    |        |     |
| 評価項目5                                                                                                                                                              | 量子化学に基づいて分子の運動を理解することができ、応用できる。                                                                                          |      | 量子化学に基づいて分子の運動を理解することができる。                        |           | 量子化学に基づいて分子の運動を理解することができない。       |        |     |
| 学科の到達目標項目との関係                                                                                                                                                      |                                                                                                                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 教育方法等                                                                                                                                                              |                                                                                                                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 概要                                                                                                                                                                 | 最先端化学分野では、量子化学に基づいた物性発現機構の解明、化合物設計や反応シミュレーションが盛んに行われている。本授業では、量子化学を基本とした物理化学理論を示し、統計熱力学的手法によりマクロな物性との関係について理解することを目的とする。 |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 授業の進め方・方法                                                                                                                                                          | 量子物理化学では、初等的でない物理や数学を扱う機会が多い。納得した理解を得るために、教科書記載の数式の導出や量子数学に関する練習問題を解く。                                                   |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 注意点                                                                                                                                                                | 量子物理化学では、本科で履修した数学的内容以外に、群論、特殊関数やフーリエ変換等の知識も不可欠である。少なくとも、本科で履修した数学、物理、理論化学をよく復習しておくこと。                                   |      |                                                   |           |                                   |        |     |
| 授業計画                                                                                                                                                               |                                                                                                                          |      |                                                   |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 週    | 授業内容                                              |           | 週ごとの到達目標                          |        |     |
| 前期                                                                                                                                                                 | 1stQ                                                                                                                     | 1週   | 水素原子の線スペクトル、ボーアの仮説と原子モデル                          |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 2週   | 光及び電子の粒子性と波動性、物質波とド・ブロイの式、波動方程式                   |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 3週   | 時間に依存しないシュレーディンガー方程式、ハミルトニアンと固有値、井戸型ポテンシャルの中の自由粒子 |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 4週   | 波動関数、固有値、直交性、期待値、演算子                              |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 5週   | 三次元極座標、水素原子のシュレーディンガー方程式                          |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 6週   | 3つの量子数                                            |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 7週   | エネルギー固有値                                          |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 8週   | 水素原子の基底状態と励起状態、波動関数の広がり                           |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    | 2ndQ                                                                                                                     | 9週   | 水素分子のシュレーディンガー方程式                                 |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 10週  | 等核2原子分子の電子配置、結合次数                                 |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 11週  | 異核二原子分子、分子の極性                                     |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 12週  | 異核二原子分子、分子の極性                                     |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 13週  | 調和振動子の固有エネルギーと波動関数、分子の振動と赤外吸収スペクトル、剛体回転子のエネルギー固有値 |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 14週  | 原子・分子の回転スペクトル、分子の電子状態、振動状態、回転状態                   |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 15週  | 原子・分子の回転スペクトル、分子の電子状態、振動状態、回転状態                   |           |                                   |        |     |
|                                                                                                                                                                    |                                                                                                                          | 16週  | 定期試験                                              |           |                                   |        |     |
| 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   | 0   | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0   |
| 専門的能力   | 100 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 100 |
| 分野横断的能力 | 0   | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0   |