

都城工業高等専門学校		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	0083		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: 1		
開設学科	物質工学科		対象学年	5		
開設期	後期		週時間数	2		
教科書/教材						
担当教員	藤森 崇夫					
到達目標						
1) 量子力学の発展の歴史を知り、古典力学との相違を認知する。 2) 自由粒子や井戸型ポテンシャルについてシュレーディンガー方程式を解き、波動関数を導き出せる。 3) 簡単な分子について波動関数より軌道エネルギーを推定できる						
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(可)	
評価項目1	量子力学の発展の歴史に基づいて、古典力学との相違について正しく説明できる。		量子力学と古典力学の相違について説明できる。		量子力学について説明できる。	
評価項目2	水素原子についてシュレーディンガー方程式を解き、波動関数を導出し、意味を説明できる。		水素原子についてシュレーディンガー方程式を解き、波動関数を導き出せる。		水素原子についてシュレーディンガー方程式を解くことができる。	
評価項目3	二原子分子の波動関数を正しく導出し、特性や反応性について定性的な結論を導くことができる。		ヘリウム分子の波動関数を正しく導出できる。		電子軌道について説明できる。	
学科の到達目標項目との関係						
教育方法等						
概要	量子化学は新しい物理学である量子力学の手法を使って化学現象を理解する学問領域である。量子力学の理論は自然科学のあらゆる分野で立証されており、その手法を原子・分子に関する非常に困難な問題に適用することで、化学現象を理論的に解釈することができる。この量子化学の諸概念を解説し、水素原子の構造に関する常識が量子化学によって明らかとされたことを確認し、その有用性を理解する。また、分子軌道法を適用した応用技術を修得する。					
授業の進め方・方法	1) 事前学習として無機化学の分子軌道法を復習すること 2) 事後学習として規定の用紙に授業内容をまとめたものを提出すること。これは自己学習のレポートとして評価する					
注意点	教科書は指定しない 参考図書；中田宗隆著「量子化学－基本の考え方16章－」東京化学同人					
ポートフォリオ						
授業計画						
		週	授業内容		週ごとの到達目標	
後期	3rdQ	1週	黒体放射と電磁波		古典力学で説明できない現象について説明できる	
		2週	光電効果とコンプトン効果		量子力学の概念により光電効果とコンプトン効果が説明できる	
		3週	原子模型とボーア理論		電子軌道が離散的に存在することを説明できる	
		4週	物質波と電子回折		ドブロイ波長を説明でき、電子の回折現象について説明できる	
		5週	シュレディンガーの波動方程式（1）		波の運動方程式に基づいて電子の波動方程式を導出できる	
		6週	シュレディンガーの波動方程式（2）		演算子、固有値、固有関数について説明できる	
		7週	水素原子の波動関数（1）		水素原子の波動方程式を説明できる	
		8週	水素原子の波動関数（2）		波動方程式に基づいて、電子軌道の固有値と固有関数を求めることができる	
	4thQ	9週	角運動量とゼーマン効果		電子の核運動とゼーマン効果について説明できる	
		10週	電子スピンと核スピン		電子と核のスピンについて説明できる	
		11週	ヘリウム原子とイオン化エネルギー		ヘリウム原子の電子軌道からイオン化エネルギーを説明できる	
		12週	パウリの排他原理とフントの規則		パウリの排他原理とフントの規則を量子化学の観点から説明できる	
		13週	水素分子とLCAO近似		分子軌道を電子軌道の線形結合により説明できる	
		14週	水素分子とヘリウム分子		水素分子について説明できる	
		15週	等核二原子分子と異核二原子分子		等核、異核の二原子分子の分子軌道を説明できる	
		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。	4	後6,後7,後8,後10
				電子殻、電子軌道、電子軌道の形を説明できる。	4	後3,後5,後6,後7,後8
				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。	4	後12
				価電子について理解し、希ガス構造やイオンの生成について説明できる。	4	後4

				元素の周期律を理解し、典型元素や遷移元素の一般的な性質を説明できる。	4	後1,後2,後13,後14,後15
				イオン化エネルギー、電子親和力、電気陰性度について説明できる。	4	後11

評価割合

	定期試験	レポート	合計
総合評価割合	80	20	100
知識の基本的な理解	60	0	60
思考・推論・創造への適応力	20	0	20
汎用的技能	0	0	0
態度・志向性（人間力）	0	0	0
総合的な学習経験と創造的思考力	0	20	20