

(科目コード : 8707420075KK)

【改訂】第31版(2013-03-21)

【科目】量子化学

【科目分類】専門科目 【選択・必修の別】必修

【学期・単位数】後期・1単位

【対象学科・専攻】物質 5年

【担当教員】辻 和秀

【授業目標】

多くの化学分野で重要な役割を果たしている量子化学の基本原則について理解を深める。  
化学結合の本質を理解し、量子論的な視点で有機化学や無機化学の問題を考えられるようになる。

1. 波動関数の性質を理解できる。
2. シュレディンガー方程式がかけられる。
3. 原子の電子軌道について、理解できる。
4. 分子の振動、回転状態について理解できる。
5. 分子の電子状態について理解できる。

【教育方針・授業概要】

本科目の総授業時間数22.5時間である。

量子化学の基礎概念

分子の振動、回転の量子論

量子化学における近似法

水素分子イオン(分子軌道法)

【教科書・教材・参考書等】

参考書：基礎量子化学：小尾欣一、渋谷一彦：化学同人

参考書：物理化学(上)分子論的アプローチ：マッカーリ・サイモン：東京化学同人

参考書：量子化学 基礎からのアプローチ：真船文隆：化学同人

【成績評価方法】

[後期]中間試験：40%、期末試験：40%、レポート：20%

【達成目標】

	達成目標	割合	評価方法
1	量子化学に関する基本的な概念を理解する	50 %	
2	簡単な微積分をつかい量子化学に関する基本的な問題を解くことができる。	50 %	

【本校の学習・教育目標】

(B-1) 工学の基礎となる自然科学の科目を理解する

(C) 技術的問題解決のための専門分野の基本的知識を身に付ける

各学科における専門科目を学習することにより、技術的課題を理解し対応できる

【授業計画】(量子化学)

回数	授業の主題	内容	レポート	宿題
1-3	量子論入門	量子論入門、ドブローイ波、ボーアモデル、シュレディンガー方程式、井戸型ポテンシャル、波動方程式、波動関数の数学的性質		
4-5	分子の振動	調和振動子、ゼロ点エネルギー、2原子分子の振動		
6-7	分子の回転	角運動量、2原子分子の回転		
8	中間試験			
9-11	原子	水素原子、多電子原子		
12	電子スピン	電子スピンと波動関数、パウリの排他原理		
13-15	分子	水素分子イオン、分子軌道法の一般則 変分法、原子価結合法		