

授業コード	2109323rm1	科目ナンバリング	-----
授業名	量子化学(RU)		
英文名	Quantum Chemistry		
配当学年	3年	単位数	2.0単位
開講年度・学期	2023年度前期	曜日・時限	火曜1限
実施教室			
授業形態	講義		
学位授与方針（DP）	数学コースDP- 物理学コースDP4 化学コースDP1 数理情報学コースDP-		
担当教員(先頭者が主担当)	類家 正稔		

目的概要	量子力学の考え方を原子、分子の系に適用し、これらの安定性などについて理解します。 まずは、ヘリウム原子を扱うことで変分法などの重要な近似法を理解し、一般の原子について考えを進め、周期律について理解を深めます。これらを基礎にして、簡単な分子の量子力学的な扱い方を学び、化学結合の本質、分子の安定性について理解します。
達成目標	1. 量子力学の手法を一般の原子に適用する方法を理解する。 2. 量子力学の手法を簡単な分子に適用する方法を理解する。 3. バイ電子共役系の安定性を量子化学に基づいて理解する。
関連科目	量子力学I 量子力学II
履修条件	量子力学 1 の内容を理解している必要があります。
教科書名	詳解 量子化学の基礎 第2版（東京電機大学出版 類家）
参考書名	一般的な量子力学の教科書、量子化学の教科書であれば何でもよい。 例えば、原田義也「量子化学（上）（下）」裳華房
評価方法	以下の割合で評価する。 レポート点数 50% 試験点数 50%
事前・事後学習	【事前学習】シラバスの指示に従い参考書等の該当箇所を目を通しておくこと。 【事後学習】毎回の授業終了後、参考書等の授業内容に対応する部分を復習すること。
自由記載欄	【アクティブラーニング】 【ICTの活用】

テーマ・学習内容	
<第1回>	ガイダンス 二電子系の取り扱い： 変分原理（証明、例題）
第1回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 「量子化学」からイメージされる内容について、予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、十分に復習してください。
<第2回>	二電子系の取り扱い： ヘリウム原子（変分法）、Ritzの変分法
第2回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて十分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、十分に復習してください。
<第3回>	多電子系の取り扱い： 一電子近似、ハートリーの方法
第3回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて十分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、十分に復習してください。
<第4回>	多電子系の取り扱い： ハートリー フォックの方法、スレーター軌道
第4回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて十分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、十分に復習してください。
<第5回>	多電子系の取り扱い： 電子配置、構成原理、周期律、スペクトル項
第5回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて十分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、十分に復習してください。
<第6回>	多電子系の取り扱い： スペクトル項、ラッセルーサウunders方式
第6回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて十分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、十分に復習してください。
<第7回>	分子の取り扱い： 原子単位系、水素分子イオン、積分変数の変換
第7回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて十分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、十分に復習してください。
<第8回>	分子の取り扱い： 水素分子（原子価結合法）、楕円対座標での積分
第8回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて十分に予習をしてください。

	【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、充分に復習してください。
<第9回>	分子の取り扱い： 水素分子（分子軌道法）
第9回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて充分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、充分に復習してください。
<第10回>	分子の取り扱い： 等核二原子分子
第10回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて充分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、充分に復習してください。
<第11回>	分子の取り扱い： 異核二原子分子
第11回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて充分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、充分に復習してください。
<第12回>	パイ電子系の取り扱い： ヒュッケル法（ブタジエン，ベンゼン）
第12回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて充分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、充分に復習してください。
<第13回>	パイ電子系の取り扱い： ヒュッケル法（鎖状ポリエン，環状ポリエン），分子図，ヒュッケル法（ヘテロ原子を含む系）
第13回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） 講義で指示する範囲等について、教科書等を用いて充分に予習をしてください。 【事後学習】（120分） 宿題プリントを活用し、講義内容について、充分に復習してください。
<第14回>	試験（試験前に、出題意図を説明します）
第14回 事前・事後学習	【事前学習】（120分） これまでの講義で扱った範囲等について、十分に復習して試験の準備をして下さい。 【事後学習】（120分） 試験問題（とくに正解できなかった問題）について、充分に復習してください。
質問への対応（オフィスアワー等）	【オフィスアワー（類家）】 時間：下記で確認してください http://chem.ru.dendai.ac.jp/Ruike/ru_i.ke.html 場所：2号館1階2141A室 講義内容の質問は講義中にさせていただくのがベストと考えますが、個人的に質問したい場合は、2141A室まで来て下さい。オフィスアワーに限らず、在室していれば、いつでも対応します。
E-Mail address	ru_i_ke@mail.dendai.ac.jp （あつとを@に変えて下さい） http://chem.ru.dendai.ac.jp/Ruike/ru_i.ke.html
履修上の注意事項（クラス分け情報）	履修上の注意事項に記載するものもみつけないことですが、「講義中は携帯電話，スマートフォンの電源を切ること」を承諾していただけない学生さんは，履修を認めません。
学習上の助言	
備考	
J A B E E	

学期末試験＜事務部記入＞	
試験方法	筆記実施
試験実施日時	2022/07/19 火 1時限
参照可否	ノートのみ可（自筆のみ）
着席方法	教員にて指示
レポート提出先	
レポート提出期限日時	
備考	