

## シラバス参照

|             |                    |
|-------------|--------------------|
| 科目名         | 量子化学               |
| 配当年次        | 1年次                |
| 開講期間        | 秋学期                |
| 単位数         | 2                  |
| 担当教員        | 寺前 裕之(テラマエ ヒロユキ)   |
| 期間・曜日・時限・教室 | 秋学期 水曜日 1時限 23-502 |

|          |  |
|----------|--|
| ※        |  |
| 授業の目的・目標 | <p>この科目は、量子化学に関する専門的な内容を学ぶための科目である。量子力学の方法が化学の問題の解決にどのように応用されているかを理解して、理論的立場から説明できるようになることが目的である。具体的には、</p> <p>(1) いろいろなポテンシャル中での電子のふるまいを量子論的に理解し説明することができるようになる。</p> <p>(2) (1)で学ぶ事柄の応用として、量子化学の最も基礎である水素原子の電子構造を理解し説明できるようになることを目標とする。</p> <p>本講義を通じて、ディプロマポリシーにおける「大学課程の化学に関する専門的な知識や技能を備え、地域社会や国際社会で活躍できる能力」を身に着けることを目標とする。</p> <p>◎ ディプロマポリシーの達成度の判定に直接利用される科目である。</p>                      |
| 準備学習等の指示 | <p>事前学習：教科書として指定する「基礎量子化学」の該当の章を3回以上読んでおくこと、また、新しい用語などについて参考図書などを参照し理解しておくこと。所要時間2時間程度</p> <p>事後学習：毎回の講義終了後、忘れないうちに講義内容をノートにまとめる。また、学修した内容に関連する例題や章末問題を解くことで理解を深めること。所要時間2時間程度</p>   |
| 講義スケジュール | <ol style="list-style-type: none"> <li>量子力学の基礎：シュレーディンガー方程式</li> <li>量子化学の基本的問題：一次元箱の中の量子</li> <li>軌道角運動量とスピン</li> <li>水素原子のエネルギー準位と軌道</li> <li>多電子原子と元素の周期性—原子のスペクトル</li> <li>分子軌道法と永年方程式</li> <li><math>\sigma</math>結合と<math>\pi</math>結合、C原子の混成軌道</li> <li><math>\pi</math>電子近似とヒュッケル法</li> <li>分子の振動</li> <li>分子の回転—剛体回転子</li> <li>光と分子</li> <li>紫外可視-赤外吸収スペクトル</li> <li>量子化学の応用</li> </ol> |
| 教科書      | 馬場 正昭 著、基礎量子化学(サイエンス社)   |
| 参考文献     | 大野 公一 著、量子化学 物理化学入門シリーズ(裳華房)細矢 治夫著、量子化学(サイエンス社)<br>P.W. Atkins著、千原秀昭・中村亘男訳、アトキンス物理化学(第8版)(上、下)、東京化学同人。   |
| 授業の方法    | 講義と演習。確認テストの解答に関し、特に必要なものに関しては、講義中に全体に講評・解説を行います。  |
| 成績評価方法   | 定期試験、演習の成績を総合的に判断する。   |
| オフィスアワー  | 随時   |
| 居室       | 23号館研究室(23-633)  |
| ホームページ   |  |
| その他特記事項  |  |
| 添付ファイル   |  |

|  |
|--|
|  |
|--|