

[前画面へ戻る](#)

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 2 3 - 5 0 2

※

①授業の概要：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。

②授業の目的：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。

③修得できる力：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。

④授業の到達目標：学生が（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。

（２）学生が（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。

⑤実務経験と授業内容との関連：

⑥地域に係る科目について：

1回の授業について、

・予習（1時間45分）：授業で取り上げる参考書などにより、授業の大まかな流れをつかんでおくこと。次回対象となる項目については各授業の終了時に説明する。

・復習（1時間45分）：授業で取り上げた重要なポイントを中心に、ノートを見直し論点を整理すること。次回授業時に適宜内容を確認し、フィードバックを行う。課題の配布や提出を行うため、WebClass等のLMSを用います。

授業の目的・目標

準備学習等の指示

講義スケジュール

■ 1回目

【テーマ】 量子力学の基礎：シュレーディンガー方程式

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 2回目

【テーマ】 量子化学の基本的問題：一次元箱の中の量子

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 3回目

【テーマ】 軌道角運動量とスピン

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 4回目

【テーマ】 水素原子のエネルギー準位と軌道

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 5回目

【テーマ】 多電子原子と元素の周期性－原子のスペクトル

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 6回目

【テーマ】 分子軌道法と永年方程式

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 7回目

【テーマ】 σ 結合と n 結合_C原子の混成軌道

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 8回目

【テーマ】 n 電子近似とヒュッケル法

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 9回目

【テーマ】 分子の振動

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 10回目

【テーマ】 分子の回転－剛体回転子

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 11回目

【テーマ】 .光と分子

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 12回目

【テーマ】 .紫外可視-赤外吸収スペクトル

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

■ 13回目

【テーマ】 量子化学の応用

【到達目標】

【準備学習】

【特記事項】

教科書 馬場 正昭 著、基礎量子化学（サイエンス社）

大野 公一 著、量子化学 物理化学入門シリーズ（裳華房）

参考文献 細矢 治夫著、量子化学（サイエンス社）

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 この講義は主として、
・講義
形式で行います。

授業方法として下記のアクティブラーニングの手法を実践します。

・問答法（学生の意見や小テストの結果、アイディア、学習理解状況を聞いて、それを基に授業を進めていく）

- ・実習、フィールドワーク

- 【フィードバック方法】なお、小テスト・課題等については、
- ・各授業回で全体（グループ）にフィードバックを実施する

学生のオンラインなどを含めた学修をサポートするため、下記のLMSを使用します。（該当以外を消してください。）

- ・WebClass

成績評価方法 【評価方法】 期末試験ならびに平常点
 【評価割合】 試験80%、平常点20%
 【評価基準】 平常点は毎回の小テストと受講態度。

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

[前画面へ戻る](#)