

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	森田 勇人(モリタ ハヤト)
期間・曜日・時限・教室	秋学期 木曜日 1時限 23-502

※	
授業の目的・目標	<p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>⑤実務経験と授業内容との関連:</p> <p>⑥地域に係る科目について:</p>
準備学習等の指示	<p>1回の授業について、</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・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。</li> <li>・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。</li> </ul> <p>課題の配布や提出を行うため、WebClass等のLMSを用います。</p>
講義スケジュール	<p>■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】量子論の必要性を説明できるようになる。 【準備学習】教科書7A,B 【特記事項】特に無し</p> <p>■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】1次元箱の中の量子のエネルギー準位を計算できるようになる。 【準備学習】教科書7C 【特記事項】特に無し</p> <p>■3回目 【テーマ】 軌道角運動量とスピン 【到達目標】軌道角運動量とスピンの何を指すかを説明できるようになる。 【準備学習】教科書8A 【特記事項】特に無し</p> <p>■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】水素原子のエネルギー準位を正しく求めることができるようになる。 【準備学習】教科書8A 【特記事項】特に無し</p> <p>■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】スピン-軌道カップリングについて説明できるようになる。 【準備学習】教科書8D 【特記事項】特に無し</p> <p>■6回目 【テーマ】 分子軌道法と永年方程式 【到達目標】永年方程式が何であるかを自分の言葉で説明できるようになる。 【準備学習】教科書9D 【特記事項】特に無し</p>

	<p>■7回目  【テーマ】<math>\sigma</math>結合と<math>\pi</math>結合、C原子の混成軌道  【到達目標】<math>\sigma</math>結合と<math>\pi</math>結合の違いを分子オービタルの持つエネルギー準位に基づいて説明できるようになる。  【準備学習】教科書9B  【特記事項】特に無し</p> <p>■8回目  【テーマ】<math>\pi</math>電子近似とヒュッケル法  【到達目標】ヒュッケル法の計算原理を説明できるようになる。  【準備学習】教科書9C  【特記事項】特に無し</p> <p>■9回目  【テーマ】分子の振動  【到達目標】調和振動子モデルの原理を説明できるようになる。  【準備学習】教科書7E  【特記事項】特に無し</p> <p>■10回目  【テーマ】分子の回転—剛体回転  【到達目標】分子を剛体として考えた時の二次元並びに3次元の回転運動を説明できるようになる。  【準備学習】教科書7D  【特記事項】特に無し</p> <p>■11回目  【テーマ】光と分子  【到達目標】分子と光の相互作用機構をせつめいできるようになる。  【準備学習】教科書11A  【特記事項】特に無し</p> <p>■12回目  【テーマ】紫外可視-赤外吸収スペクトル  【到達目標】分子が吸収する光の波長と分子構造との相関を説明できるようになる。  【準備学習】教科書11D  【特記事項】特に無し</p> <p>■13回目  【テーマ】量子化学の応用  【到達目標】励起状態の減衰に関する実例としての蛍光と燐光の違いを説明できるようになる。  【準備学習】教科書11E  【特記事項】特に無し</p>
教科書	馬場 正昭 著、基礎量子化学(サイエンス社)
参考文献	千原英昭他 アトキンス物理化学要論 第7版 東京化学同人
授業の方法	<p>この講義は主として、</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・講義形式で行います。</li> </ul> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・問答法(学生の意見や小テストの結果、アイデア、学習理解状況を聞いて、それを基に授業を進めていく)</li> <li>・実習、フィールドワーク</li> </ul> <p>【フィードバック方法】なお、小テスト・課題等については、</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・各授業回で全体(グループ)にフィードバックを実施する</li> </ul> <p>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。)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・WebClass</li> </ul>
成績評価方法	<p>【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。</p>
オフィスアワー	随時
居室	23号館研究室(23-608)
ホームページ	
その他特記事項	
添付ファイル	