

科 目		必・選	担 当 教 員		学年・学科			単位数	授 業 形 態				
量子化学 Quantum Chemistry		選	水野一彦		5 年生 物質工学科			1	半期 週 2 時間				
授業概要		1. すでに学習した原子軌道、分子の形および化学結合の考え方について定量的に取り扱う。 2. 簡単な量子力学から出発し、分子軌道を学ぶ。また量子化学の知識を活かして、実際の有機反応を分子軌道論的にどう予測・解釈していけばよいかを学ぶ											
到達目標		1. 量子とはどうことかを理解できること。 2. 単純な原子・分子の軌道計算方法が理解できること。 3. 分子軌道法と有機反応との関係が理解できること。											
評価方法		各定期試験（70％）、確認シート、演習問題およびレポート（30％）で評価し、2回の定期試験を平均して、この教科の評価とする。											
教科書等		教科書： <u>絶対わかる量子化学</u> （斎藤勝裕著）講談社サイエンティフィク 参考書： <u>量子化学（演習による基本の理解）</u> （中田宗隆著）東京化学同人： <u>分子軌道論</u> （斎藤勝裕著）講談社サイエンティフィク											
内 容										学習・教育目標			
第 1 週		量子論とは？ 光は波か粒子か？								C-1			
第 2 週		シュレディンガー-波動方程式								C-1			
第 3 週		量子化：不連続な量								C-1			
第 4 週		波動関数とエネルギー								C-1			
第 5 週		原子軌道								C-1			
第 6 週		電子の移動								C-1			
第 7 週		共有結合と分子軌道法								C-1			
第 8 週		分子軌道の計算								C-1			
第 9 週		結合性軌道と反結合性軌道								C-1			
第 1 0 週		複雑な分子の構造：混成軌道の考え方								C-1			
第 1 1 週		分子の性質と分子軌道：単純ヒュッケル計算								C-1			
第 1 2 週		光と分子の相互作用 – I								C-1			
第 1 3 週		光と分子の相互作用 –II								C-1			
第 1 4 週		光化学と熱化学 – I ：フロンティア軌道の考え方								C-1			
第 1 5 週		光化学と熱化学 –II								C-1			
第 1 6 週													
第 1 7 週													
第 1 8 週													
第 1 9 週													
第 2 0 週													
第 2 1 週													
第 2 2 週													
第 2 3 週													
第 2 4 週													
第 2 5 週													
第 2 6 週													
第 2 7 週													
第 2 8 週													
第 2 9 週													
第 3 0 週													
(特記事項)			JABEEとの関連										
			JABEE	a	b	C	d1	d2a) d)	d2b) c)	e	f	g	h
			本校の学習	A	A	C-1	C-1	C-2	B	B	D	C-3	B
			・教育目標			◎							

1. 合格ラインについて、特に記載の無いものは、60点以上を合格とします。

2. 定期試験について、特に記載の無いものは、評価配分を均等とします。（【例】年4回定期試験を実施した場合の各定期試験の評価配分は、特に記載の無いものは、25%ずつとなります。）

## 量子化学 5年

量子化学、計算化学は現代化学の発展の鍵を握る重要な分野になっている。コンピュータの性能が向上し、高速計算が可能になった現在、研究開発現場でも高い頻度で用いられるようになってきている。半年間で量子化学とは何か、どのような応用が可能かを学習する。

### 学習の概要

1. 実験事実や物性を古典的なニュートン力学やマクスウェル電磁気学では説明できない現象が多数現れたため、それらを説明するために量子論（量子力学）が生まれた。光と電子の二重性—光の粒子性、電子の波動性をいろいろな現象から考える。
2. ド・ブロイの考え方を波の方程式に当てはめてシュレディンガーの波動方程式がどのように導き出されたか学ぶ。
3. 波動関数の意味とエネルギーについて学習する。
4. 分子の振動と回転のエネルギーについて学ぶ。
5. シュレディンガー-波動方程式の解と1s、2s、2p等の軌道との関係を明らかにし、原子の構造について学ぶ。
6. 光とエネルギーの関係を学び、電子の移動がどのようにして起こるかを学習する。
7. 共有結合の分子軌道をどのように表すか、そのときのエネルギーと波動関数をどのように求めるか学ぶ。
8. 原子の一次結合を分子軌道と考え、変分法を使って解いてみる。
9. 分子軌道法における結合性軌道と反結合性軌道の役割を学習する。
10. 混成軌道の考え方を学ぶ。
11. 非局在 $\pi$ 結合系の分子軌道と軌道エネルギーについて学ぶ。単純ヒュッケル計算の近似法を学び、単純な分子の計算法を学ぶ。
12. 光と分子との相互作用について学び、分子の励起状態の性質を知る。
13. 有機分子の発光ならびに振動回転スペクトルについて学ぶ。
14. 光化学と熱化学の違いを学ぶ。フロンティア軌道の考え方を具体的な例をあげて説明する。
15. 単純ヒュッケル計算の結果を光化学や熱化学における閉環—開環反応等に応用する。