

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	高木浩一		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：絶対わかる量子化学 斎藤勝裕 講談社 参考書：分子軌道論、斎藤勝裕著、講談社サイエンティフィックおよび補助プリント												
内 容									学習・教育目標				
第 1 週	量子論が生まれた背景、電子は粒子か波か								C-1				
第 2 週	シュレジンガー波動方程式								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	共有結合と分子軌道								C-1				
第 7 週	分子軌道の計算								C-1				
第 8 週	結合性軌道と反結合性軌道								C-1				
第 9 週	異なった軌道間の相互作用								C-1				
第 1 0 週	混成軌道の考え方								C-1				
第 1 1 週	単純ヒュッケル計算								C-1				
第 1 2 週	ヘテロ原子を含む単純ヒュッケル計算								C-1				
第 1 3 週	コンピューターを用いた実際の計算								C-1				
第 1 4 週	フロンティア軌道の考え方								C-1				
第 1 5 週	光の吸収スペクトルについて								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%ずつになります。）

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ます。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します。

学習の概要

1. 実験事実や物性を古典論（ニュートン力学・マッ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）が生まれました。
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ます。
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を学習します。
3. 古典的なエネルギーと量子的なエネルギーを考えます。
4. 一次元の箱の中の粒子を取り上げ、波動関数の意味とエネルギーについて学習します。
5. シュレジンガー-波動方程式の解と我々が用いている軌道の関係を明らかにします。どのように1 s、2 s、2 p等の軌道が出てきたか、理解します。
6. 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を学習します。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ます。
7. 実際のエチレン分子の π 結合について計算してみます。
8. 計算結果から出てくる結合性軌道と反結合性軌道の役割を学習します。
9. 異なった原子間での相互作用でどのような軌道図になるかを考えます。ホルムアルデヒドの軌道図のエネルギーダイアグラムを作ってみます。
10. 原子軌道の一次結合を作り、sp³混成軌道を解いてみます。そしてその結合角が正四面体の角度になる事を確かめます。
11. 単純ヒュッケル計算の近似法を学び、計算する方法を学習します。
12. それをヘテロ原子が含まれている分子に応用します。
13. 単純ヒュッケル計算のプログラムを用いて、いくつかの化合物をコンピュータを用いて解いてみます。
14. そして出てきた値をどのように有機化学に応用していくかを学びます。たとえば、置換ベンゼンの配向性の説明が出来るか、考えてみます。
15. フロンティア軌道の考え方を説明し、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—開環反応に応用してみます。
16. 単純ヒュッケル計算から導かれる軌道エネルギーの利用の問題として、色素の吸収スペクトルに応用してみます。