

科目名	物理化学特論	JABEE科目	科目コード 449
-----	--------	---------	--------------

学年・学科等名	5 学年	物質化学工学科	選択科目
単位数・開講期	2 単位	後期	
総時間数	90 時間	講義 30 + 自学自習 60	
担当教員	高田 知哉		

本校の教育目標	3	物質化学工学科の教育目標	2
---------	---	--------------	---

JABEE関連	教育プログラム科目区分	204基礎工学科目④力学系
	教育プログラムの学習・教育目標	A-2(20%) D-1(50%) D-2(30%)
	JABEE基準	d

教科書名	化学結合の量子論入門(小笠原正明、田地川浩人 著、三共出版)
補助教材	プリント(講義資料、演習問題)
参考書	量子化学入門(上)(下)(米沢貞次郎 他 著、化学同人) 分子軌道法 MOPAC ガイドブック(平野恒夫 他 著、海文堂)

A. 教育目標

量子化学の基礎と応用について学び、実際の化学現象を量子化学的な視点で捉える力を身につける。

B. 概要

ここまでで学んだ熱力学・反応速度論とともに物理化学の中核をなす、量子化学の基礎理論について学ぶ。

C. 学習上の留意点

量子化学の学習では、抽象的な論理を漠然と追うのではなく、演習問題にしっかり取り組むことで論理的な理解も深めることができる。またその反対に、問題を解く際にはその背景にある概念についても考えることでイメージがつかめる。量子化学を学ぶ際には、理論的な内容と実際の問題を常に関連させて考えることが必要である。

D. 評価方法

試験(70%) 小テスト・課題・レポート等(30%)

E. 授業内容

授業項目	時間	内 容	教 育 プログラム
量子化学について	1	量子化学がどのような領域を扱う学問かがわかる。	A-2 D-1
量子力学の基礎	7	量子化学を理解するための量子力学の基本事項(粒子性と波動性、シュレーディンガー方程式、波動関数、演算子変換など)がわかる。	D-2
原子の状態とエネルギー	2	原子の電子状態を記述するための基本事項(量子数、原子軌道、Pauli の規則、Hund の規則、遮蔽効果など)がわかる。	
原子軌道と分子軌道	2	水素原子と水素分子を例として、原子軌道から分子軌道が構成されることを理解する。結合性軌道と反結合性軌道の概念がわかる。	
等核 2 原子分子の分子軌道	2	多電子原子の軌道の相互作用による分子軌道の成り立ちについての概要がわかる。簡単な等核 2 原子分子の分子軌道の描像を描くことができる。	

授業項目	時間	内 容	教 育 プログラム
(前期中間試験)	2		
複雑な分子の分子軌道	2	異核2原子分子、多原子分子の分子軌道の描像を描くことができる。	A-2 D-1
基本的な分子軌道計算	6	最も基本的な分子軌道法であるヒュッケル法の原理を理解し、共役炭化水素の電子状態を解析することができる。分子軌道計算で用いられる近似法について知り、計算プログラム MOPAC を使って実際の分子軌道計算を行なうことができる。	D-2
バンド理論	2	固体のバンド理論について理解し、固体のバンドギャップと電気伝導性の関連を説明できる。	
化学反応と分子軌道	4	分子軌道法の結果から化学反応性を予測する考え方がわかる。フロンティア軌道理論、Woodward-Hoffmann 則がわかる。	
化学反応と分子軌道			
◆自学自習 ・授業内容の復習、予習 ・演習問題の見直し ・定期試験準備	60	授業内容の復習・予習、授業中に行なう演習問題や小テストの解法の見直し、定期試験の準備のための時間を合わせ、60 時間を自学自習時間とする。	A-2 D-1 D-2

F. 関連科目

物理 I・II、応用物理 I・II、物理化学I・III、物理化学実験