科目名（Eng）	量子化学（Quantum Chemistry）								
担当教員	百瀬 義広								
対象学年等	学科・専攻	学年	授業期間・区分・単位数・時間数				分野	形態	学習単位科目
	物質工学科	5	前期	必修	1	30	専門	A	

目標基準との対応	福島高専の教育目標との対応：(B-2)．(B-4)．
	卒業時に身に付けるべき学力や資質・能力との対応：2)．
	JABEE基準1(1)との対応：(d)-(1)．(d)-(2)-a)．
授業の概要と方針	原子・分子の世界では量子論を使わなければならない。量子論ではエネルギーはすべて量子数によって表される。原子・分子の各電子はどんなエネルギーとどんな軌道によって表されるか注目する。
到達目標	原子では周期表の構成が理解できること。分子の化学結合を分子軌道と電子配置によって理解する。

授業計画

	週	授業項目	理解すべき内容	事前学習
前期	1	量子論の誕生	電磁波の振動数と光量子	振動数、光量子の単位に関する調査を行っておくこと
	2	原子スペクトル	水素原子の発光スペクトルとリュードベリ定数	教科書30頁の問題3.2を解いておくこと
	3	原子模型とボーアの理論	角運動量の量子化と電子のエネルギーの量子化	角運動量の意味と単位に関する調査を行っておくこと
	4	シュレーディンガーの波動方程式	波動方程式の表し方、ハミルトン演算子	波動関数に関する資料（配付予定）を読んでおくこと
	5	水素原子の波動関数（1）	極座標、量子数と軌道関数	極座標と軌道関数の関係を整理しておくこと
	6	水素原子の波動関数（2）	軌道関数の形、動経分布関数	教科書73頁の表7.1原子軌道関数を調査しておくこと
	7	第1週から第6週までの確認	答案の確認と学習内容の確認	
	8	角運動量とゼーマン効果	方位量子数および磁気量子数と外部磁場	磁気モーメントの意味とその外部磁場との関係を調査しておくこと
	9	電子スピンと核スピン	スピン磁気量子数、スピン多重度	軌道と電子スピンの二つの角運動量ベクトルの合成を調査しておくこと
	10	ヘリウム原子	イオン化エネルギーと有効核電荷	教科書112頁の問題10.1を解いておくこと
	11	パウリの排他原理とフントの規則	ヘリウム原子および炭素原子のの電子状態	教科書123頁の表11.1を調査しておくこと
	12	水素分子イオンとLCAO近似	結合性軌道と反結合性軌道	結合性軌道と反結合性軌道の特徴を調査しておくこと
	13	水素分子とヘリウム分子	分子の電子配置と結合エネルギー	教科書147頁の表13.1を調査しておくこと
	14	等核二原子分子と結合次数	σ軌道とπ軌道、結合次数	教科書157頁の表14.1を調査しておくこと
	15	異核二原子分子と双極子モーメント	LiF、HF、NOの電子配置	教科書167頁の表15.1を調査しておくこと

試験について	中間試験は共通科目試験日に行う。試験時間は期末試験とも50分で実施する。
評価方法	定期試験の成績を80%、課題レポートを20%として総合的に評価する。
教科書	量子化学 基本の考え方16章、中田宗隆、東京化学同人
参考書	基礎化学結合論、小林常利、培風館 量子化学、細谷治夫、サイエンス社
関連科目	
履修上の注意	電子スペクトル、NMR、分子構造の基礎となるのでよく理解して欲しい。微分・積分、行列などを使うので数学も勉強して欲しい。