

教科に関する科目：シラバス

授業科目名： 量子化学 1	教員の免許状取得のための 必修科目 / 選択科目	単位数： 2 単位	担当教員名：〔複数教員担当〕 小関 史朗
科 目	教科に関する科目（中学校及び高等学校 理科）		
施行規則に定める科目区分	中学校 理科 ・化学 高等学校 理科 ・化学		
授業の到達目標及びテーマ			
原子・分子内の電子の基礎的な特性について、量子力学的に理解すること。			
授業の概要			
現代化学における研究を遂行するための基礎的知識を習得するために、量子力学に基づいた化学結合の理論的に理解することに重点を置き、講義する。分子の構造や性質および化学反応が起きるしくみを電子の状態と対応づけて解説する。特に、本質的な理解を促すために、量子力学で必要とされる基礎的な数式の導出およびその意味を理解することに注目する。本講義で現れる知識は、あらゆる研究分野において必要とされる基礎的な知識であることを認識し受講することを望む。			
授業計画（量子化学 1） 教科書：McQuarrie-Simon 著・物理化学（上）			
第 1 回：講義内容の説明と計画。量子化学 2			
第 1 回：第 1 章 量子論の夜明け			
第 2 回：第 1 章 電子の二重性、ボーアの模型			
第 3 回：第 2 章 古典的波動方程式			
第 4 回：第 3 章 シュレーディンガー方程式と箱の中の粒子			
第 5 回：第 4 章 量子力学の仮説			
第 6 回：第 4 章 量子力学の一般原理			
第 7 回：第 5 章 3次元空間の運動の分離・調和振動子			
第 8 回：第 5 章 剛体回転子			
第 9 回：第 6 章 水素（類似）原子（1）極座標への変換、動径部分と角度部分。			
第 10 回：第 6 章 水素（類似）原子（2）変数分離：角度部分の解、調和振動子と剛体回転子で表される。			
第 11 回：第 6 章 水素（類似）原子（3）動径部分の解と電子分布の解析			
第 12 回：第 6 章 水素（類似）原子（4）多電子系への拡張、電子スピンと周期律			
第 13 回：第 6 章 水素（類似）原子（5）多電子原子の化学的特性と周期律の関係			
第 14 回：第 8 章 多電子原子：2 電子原子から多電子系へ。 1.			
第 15 回：第 8 章 多電子原子：2 電子原子から多電子系へ。 2.			
定期試験			
テキスト			
・McQuarrie, Simon 著：物理化学（上），東京化学同人 1999 年			
参考書・参考資料等			
・量子化学，大野公一著（岩波書店），量子化学（上・下），原田義也著（裳華房）			
本講義では、物理化学（上）の第 1 章より第 6 章までを目標として、引き続き 2 年次後期の量子化学 2 において復習とともに第 7 章から第 12 章までを目標として講義を行う。講義の進行に伴い多少内容が前後する場合がある。			
学生に対する評価			
定期試験に重きをおく。60 点以上を獲得することが最低条件である。			