

教科に関する科目：シラバス

<b>授業科目名：</b> 量子化学 2	教員の免許状取得のための 必修科目 / 選択科目	<b>単位数：</b> 2 単位	<b>担当教員名：〔複数教員担当〕</b> 小関 史朗
<b>科 目</b>	教科に関する科目 (中学校及び高等学校 理科)		
<b>施行規則に定める科目区分</b>	中学校 理科 ・化学 高等学校 理科 ・化学		
<b>授業の到達目標及びテーマ</b> 分子の化学結合を電子の状態と対応づけて理解し、分子の構造を			
<b>授業の概要</b> 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。			
<b>授業計画 (量子化学 2)</b> 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 1 の単位を取得していない学生は受講不可? 第 2 回 : 第 6 章 水素 (類似) 原子: 復習。 第 3 回 : 第 7 章 近似的方法: 変分法 第 4 回 : 第 7 章 近似的方法: 摂動論 第 5 回 : 第 8 章 多電子原子: 2 電子原子から多電子系へ。スピン多重度。 第 6 回 : 第 9 章 化学結合: 二原子分子 第 7 回 : 第 10 章 多原子分子における結合 第 8 回 : 第 9 章 化学結合: 二原子分子。水素分子イオンと等核二原子分子。 第 9 回 : 第 9 章 化学結合: 二原子分子。異核二原子分子。 第 10 回 : 第 10 章 多原子分子における結合: 三原子分子。Walsh diagram。 第 11 回 : 第 10 章 多原子分子における結合: 混成軌道と分子構造。 第 12 回 : 第 10 章 多原子分子における結合: 三原子分子。Walsh diagram。 第 13 回 : 第 10 章 多原子分子における結合: $\pi$ 電子近似。 第 14 回 : 第 11 章 計算量子化学: ガウス関数の利用。 第 15 回 : 第 12 章 群論: 対称性の利用 定期試験			
<b>テキスト</b> ・McQuarrie, Simon 著: 物理化学 (上), 東京化学同人 1999 年			
<b>参考書・参考資料等</b> ・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) 量子化学 1 における物理化学 (上) の第 1 章より第 6 章まで習得していることを前提とし、その復習とともに第 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可能性がある。			
<b>学生に対する評価</b> 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。			