

授業科目 の区分	専門科目	授業科目 欧 文	量子機能化学 Quantum Chemistry	講義 番号	C 3 0 7
担当教官名	対象年次	開 講 期	授業時数	選択・必修の別	単位数
松島良華	3 年	前期	30	選択	2
曜日、時限		講義室			
概略	量子化学は、物質の構造・機能・反応性を電子の波動性まで掘り下げて微視的に解析する学問であり、機能物質の創製や材料開発など、その本質を理解し物質を自在に操る化学技術者にとっては必要不可欠である。この授業では、量子論の基礎概念を理解し、化学結合や電子分布、化学反応性に応用するための基礎を学習する。				
一般目標	粒子の波動性と Schrodinger 方程式の意義を理解すること、及び波動関数から粒子の状態に関するあらゆる情報が引き出せることを理解すること、そして、より複雑な分子に対しても、近似波動関数 から有用な化学的性質や反応性を予測する方法を修得すること。				
個別目標	<ol style="list-style-type: none"> 1. 粒子の波動性と Schrodinger 方程式の意義を理解すること、及び簡単な Schrodinger 方程式を解いて波動関数 を求める方法の修得 2. 波動関数 と演算子方程式の意義を理解し、これらを用いて任意の物理量を求める方法の修得 3. 極座標系 Schrodinger 方程式を解いて得られた水素原子波動関数の意味（形状、方向、電子分布状態等）を理解すること 4. 原子波動関数の線形結合近似により、簡単な分子の波動関数を計算し、電子配置、エネルギー、電子分布状態などを求める方法の修得 5. 電子共役系の波動関数（HMO 係数）から、エネルギー状態、芳香族性、電子密度、結合次数など諸物性を計算する方法、及びフロンティア軌道法により化学反応性を予測する方法、などの修得 				
受講要件	微分・積分、線形代数学、及び微分方程式の基礎を履修しておくこと。通常一回の授業に対して2,3時間程度の復習をすること、時間を掛けて毎回こつこつ積み重ねの勉強が不可欠である。他の化学系学科目と比べ負担が倍増することを覚悟して欲しい。				
履修上の注意	化学系の学生には、量子化学は“難解でなじみ難い”とよく云われるが、紙と鉛筆を使って例題や基礎的問題を解いて“慣れる”のが理解のコツである。数学や物理の苦手な学生も、毎回、講義直後の復習に時間を掛け、特に、例題や類題を自分で解いて、着実に身に付けて欲しい。				
授 業 内	1	粒子の波動性：電子線回折と X 線回折の比較等から、先ず、粒子の波動性の事実を理解する。de Broglie（物質波）式を導入すると、古典的な波の式から Schrodinger 方程式、及び、不確定性原理等が導かれることを学習する。			
	2	簡単な Schrodinger 方程式（一次元の箱入粒子）を解き、運動量やエネルギーの量子化が境界条件に起因すること、波動関数と粒子存在確率との関係等を学習する。			
	3	（一次元箱入粒子の応用例として）電子共役系と電子スペクトル、又は、量子サイズ効果等を議論する。この頃、小テストを行う予定。			
	4	量子力学の仮定、Schrodinger 方程式と演算子、及び波動関数の意義について基礎事項を学習する。			
	5	演算子と波動関数の使い方の例をいくつか学習し、特に、波動関数 から、粒子の状態に関する“全ゆる情報”が引き出せることを理解させる。学習の要点と復習、演習問題と解き方。			

容	6	中間テスト
	7	水素原子の Schrodinger 方程式を極座標系で表し変数分離法による解き方の流れをざっと説明し、数学的な解法の詳細は割愛する。
	8	水素原子波動関数の解釈：形の図示、電子密度分布、ポーア半径との関係等
	9	多電子原子、スピン関数、反対称全波動関数（パウリ則）
	10	化学結合論：原子波動関数を用いて分子波動関数を近似する（LCAO 近似）が、基礎概念として、先ず、波動関数の重なりと位相、及び電子分布の関係を理解する。
	11	LCAO 近似と変分原理を適用して Schrodinger 方程式を解き、二原子分子（等核及び異核）の波動関数を求める方法を学習する。その結果から分子の電子配置、エネルギー、電子分布等を議論する。
	12	多原子分子の波動関数の求めるために Huckel 近似法を導入し、直鎖状と環状分子の波動関数やエネルギー等を比較・考察する。この頃、小テスト予定。
	13	電子共役系の波動関数、非局在化（共鳴）エネルギー、芳香族性、電子密度、結合次数、フロンティア軌道と化学反応性など。
	14	演習（問題の解き方）又は中間テスト
	15	期末テスト
成績評価	平常点（小テスト、中間テスト、及びレポート）の合計と、期末テストの成績を合わせて評価するが平常点を重視する（例えば、平常点合計：期末テスト＝2：1～1：1程度）予定である。普段の授業と復習でコツコツと毎回時間を掛けて着実に身につけて欲しい、そのため随時小テストを行う。出題内容は、平易だが基礎的で重要な例題や類題が大部分である。	
関連科目	物理化学、有機化学、無機化学、生物化学、機能化学、その他、化学関連分野の殆ど全てに関連する。	
JABEE との関連		
アンケート	最後またはその直前辺りの講義時間に授業アンケートを行う。	
教材	出席者に講義メモを随時配布するが、あくまで授業の説明資料やメモにすぎない（自習用のテキストではない）。参考書：（1）「アトキンス物理化学要論」（P.W.Atkins 著、千原秀明・稲葉章訳、東京化学同人）第 8，9 章、（2）「マッカーリ・サイモン物理化学（上）」（D. A. McQuarrie・J.D. Simon 著、千原秀明・江口太郎・斎藤一弥訳、東京化学同人）、（3）「アトキンス物理化学上」（P.W.Atkins 著、千原秀明・中村恒男訳、東京化学同人）第 11-14 章。	
相談時間	随時	
連絡先	自室番号：物質 2 号館 4 0 4 号室、電話：478-1143、E-mail：tcrnats@ipc.shizuoka.ac.jp	
備考		