

講義科目名称： 量子材料化学

科目コード： 51190

英文科目名称： Quantum Chemical Approaches to Materials Science

開講期間	配当年	単位数	科目必選区分
1・2年前期	1・2	2	選択
担当教員			
山崎 誠志			
添付ファイル			

講義概要	量子化学の基礎的な概念およびコンピュータ支援設計を念頭においた反応設計や分子設計について講義する。まず、量子力学にもとづき、分子の電子状態を記述する波動関数を求める方法を学び、分子の構造、電子状態、反応性がどのように解明できるかについて理解してもらう。次に、量子化学的アプローチによる物質設計、すなわち有機反応の設計や分子設計等について触れる。		
授業計画	1	量子化学の基礎 量子力学と原子構造、シュレディンガー方程式と波動関数、エネルギー固有値、原子軌道	
	2	分子系のシュレディンガー方程式 1電子近似、LCAO法、分子軌道	
	3	分子系のシュレディンガー方程式の解き方 変分法、摂動法	
	4	簡単な分子軌道法 π 電子近似、単純ヒュッケル法	
	5	鎖状 π 電子系(1) 単純ヒュッケル法による分子軌道の求め方、結合性軌道、反結合性軌道、非結合性軌道、重なり積分、クーロン積分、共鳴積分	
	6	鎖状 π 電子系(2) $n\pi$ 電子系、永年行列式、分子軌道の説の数とエネルギー、AO計数間の関係、分子軌道の直交性	
	7	環状 π 電子系 永年行列式、分子軌道、交互炭化水素、非交互炭化水素	
	8	単純ヒュッケル法の検討と評価 重なり積分、共鳴積分、電子密度、結合次数、全エネルギー	
	9	拡張ヒュッケル法 方法の概要、電子密度、結合次数、ポピュレーション解析	
	10	近似を高めた分子軌道法 半経験的量子化学計算、非経験的量子化学計算、量子化学計算の精度	
	11	反応の設計(1) HOMO、LUMOの概念、フロンティア軌道、フロンティア電子密度	
	12	反応の設計(2) エチレンとブタジエンのDiels-Alder反応、HOMO-LUMOの重なり	
	13	反応の設計(3) Diels-Alder反応の設計、電子吸引性と電子供与性置換基の効果	
	14	分子の設計と反応(1) 原子軌道の周期的傾向、軌道の混成、高周期元素の結合特性	
	15	分子の設計と反応(2) 多重結合を持つ分子、多面体分子、置換基効果	
授業形態	講義形式で行う。 演習も行う予定。 アクティブラーニング：①:10回, ②:5回, ③:3回, ④:3回, ⑤:2回, ⑥:2回		
達成目標	1. シュレディンガー方程式を理解でき、簡単なポテンシャル問題を解くことができる。 2. 分子系のシュレディンガー方程式をたてることができ、解くための近似的方法を使うことができる。 3. ヒュッケル分子軌道法を用いて、分子軌道を求めることができ、化学反応性がHOMO-LUMO相互作用とどのように関係しているか、考察できる。 4. ヒュッケル分子軌道法を自分で使うことができ、量子化学的考察により、さらに高度な反応設計や分子設計ができる		
評価方法・フィードバック	授業期間中の課題(50%) および期末における課題(50%)で評価する		
評価基準	上記の課題の合計点が、100点満点で60点以上あれば合格とする。 評価は、秀(1-4)：100点～90点、優(1-3)：89点～80点、良(1-2)：79点～70点、可(1)：69点～60点、不可：59点以下とする。		
教科書・参考書	参考書：西本吉助、今村詮、山口兆、山辺信一、北浦和夫 『分子設計のための量子化学』 (講談社)		
履修条件	なし		
履修上の注意	なし		
準備学習と課題の内容	毎回の授業に対して、2時間以上、自分で復習をして理解し、次の授業に臨むことが必須である。		

ディプロマポリシーとの関連割合 (必須)	知識・理解:30%, 思考・判断:30%, 関心・意欲:10%, 態度:10%, 技能・表現:20%
-------------------------	--