

授業科目名 ( 英文名 )	量子化学 ( Quantum Chemistry )	科目区分 対象学生	
単位数	2.0	開講年次・ 学期	3年次・前期
担当教員	山名 一成	所属	応用化学専攻
オフィス・場所		連絡先	
講義目的及び到達目標	<p>量子化学は、量子力学の化学への応用であり、対象とする分子内の電子の挙動を明らかにするための基盤となる。従って、化学反応、分子物性、分子間相互作用などを根本的に理解する上で重要である。最近では、複雑な構造を持つ生体分子の性質の解明や機能性材料の設計と機能解析など様々な分野で使われている。</p> <p>ここでは、量子化学の基本を概説する。</p>		
講義内容・授業計画	<ol style="list-style-type: none"> <li>1 量子力学の誕生</li> <li>2 シュレジンガー方程式</li> <li>3 一次元箱内粒子</li> <li>4 水素原子</li> <li>5 原子構造と電子</li> <li>6 分子軌道法</li> <li>7 水素分子イオン</li> <li>8 等核2原子分子</li> <li>9 シグマ軌道とパイ軌道</li> <li>10-11 電子近似分子軌道法</li> <li>12 フロンティア電子軌道法</li> <li>13 ウッドワード・ホフマン則</li> <li>14-15 まとめ</li> </ol>		
テキスト	板書		
参考文献	初めて学ぶ量子化学 ( 培風館 ) 量子化学入門 ( 上下 ) ( 化学同人 )		
成績評価の基準・方法	中間試験、期末試験		
履修上の注意・履修要件	特になし		
実践的教育	該当しない		
備考			