

電気通信大学 平成16年度シラバス

授業科目名	物質生命情報工学演習		
英文授業科目名	Exercises in Materials and Bioinformatics Engineering		
開講年度	2004年度	開講年次	3年次
開講学期	5 学期	開講コース・課程	夜間主コース
授業の方法		単位数	2
科目区分	専門科目-専門共通科目-必修科目		
開講学科・専攻	量子・物質工学科		
担当教官名	成澤 孝敏[櫻森]		
居室			

公開E-Mail	授業関連Webページ
narisawa@les.pc.uec.ac.jp	http://cryo1.pc.uec.ac.jp/qc/

【主題および達成目標】
分子構造や分子の振る舞い、スペクトルをより良く理解するために量子化学を学ぶ。 そのために演習問題のやさしい例題をなるべく多く取り入れる予定。 原子・分子の状態を量子力学に基づいて説明できる力を養う。

【前もって履修しておくべき科目】
微分積分学第一，微分積分学第二，化学結合と構造

【前もって履修しておくことが望ましい科目】

【教科書等】
教科書：マッカーリ・サイモン 物理化学（上）分子論的アプローチ（東京化学同人）

【授業内容とその進め方】
教科書はつぎのような柱：つまり量子論の始まり、古典的波動方程式、シュレディンガー方程式、調和振動子と剛体回転子、水素原子、変分法、摂動論、多電子原子、二原子分子、多原子分子、計算量子化学、対称性の利用、分子分光學等の章を用意しているが、中間試験を含め全13回の授業におさまるように取捨選択して授業をすすめる予定。

電気通信大学 平成16年度シラバス

【成績評価方法及び評価基準(最低達成基準を含む)】

中間及び期末試験の成績に、宿題に対して提出されたレポートの成績も評価する。

成績評価：(宿題の評価点 25%) + (中間試験の評価点 35%) + (期末試験の評価点 40%)

評価基準

水素原子のスペクトルを説明できる。

固有値問題が理解できている。

量子力学と古典力学の対応付けができる。

量子数を元にしてオービタルを説明できる。

ヒュッケル分子軌道法を簡単な分子に適用できる。

【オフィスアワー：授業相談】

適宜相談に応じるが、電子メールなどで事前にアポイントを取ること。

電子メールでの質問も受け付ける。

【学生へのメッセージ】

きちんと自分の手で問題を解いて式を理解するように

【その他】