

2015年度 前期		リフレクションペーパー						
学科名	生物環境化学科							
科目名	分子シミュレーション							
科目区分	専門科目	単位数	2	開講時期	3年前期			
必修・選択の別	選択							
担当者	河済博文							
授業の到達目標 (シラバスから)	<ul style="list-style-type: none"> 量子化学の基礎を成す考えである二重性(波動性と粒子性)について正しく説明できるようになる。 量子化学による分子レベルでの化学結合の本質を説明できるようになる。 分子構造を理論的に求める方法である分子軌道法や原子価結合法につき説明できるようになる。 分子軌道計算ソフトを利用して、分子構造が計算でき、その解釈ができるようになる。 光と分子の相互作用、すなわち吸収と発光に関して分子レベルで説明できるようになる。 							
日程と内容	<p>4/ 8 導入講義：授業の進め方と概要の説明、成績評価法、原子の構造に関する基本的事項の復習</p> <p>4/15 電子の挙動における粒子性と波動性につき学ぶ。</p> <p>4/22 波動関数とは何かを理解し、それによって表される水素原子の電子状態につき学ぶ。</p> <p>4/29 多電子原子における電子状態と電子配置を決める組み立て原理につき学ぶ。</p> <p>5/13 化学結合の本質は何か、これまでに学んだ量子化学の知識により理解する。</p> <p>5/20 分子の構造を求めるVSEPR法、原子価結合(VB)法、分子軌道(MO)法の考え方につき学ぶ。</p> <p>5/27 原子価結合法の詳細とその応用である混成軌道法につき学ぶ。</p> <p>6/ 3 分子軌道法の詳細と2原子分子における分子軌道と電子状態につき学ぶ。</p> <p>6/10 多原子分子におけるMO法の取り扱いと具体的な分子における電子状態につき学ぶ。</p> <p>6/17 電子状態を計算するためのソフトウェアの紹介とその取り扱いにつき学ぶ。</p> <p>6/24 計算化学ソフトウェアを用いた電子状態の計算結果の解釈につき学ぶ。</p> <p>6/ 1 計算結果から求められる分子の性質を表すパラメータつき理解し、反応経路の予測につき学ぶ。</p> <p>7/ 8 電子状態の励起と緩和とは何かを理解し、分子レベルでの光との相互作用につき学ぶ。</p> <p>7/15 この講義のまとめとして、科学計測の基本としてスペクトロスコピーの全体像につき学ぶ。</p> <p>7/22 定期試験(60分)</p> <p>7/29 パソコンを使っの演習</p>							
成績評価基準	定期試験	70%	実技	0%	臨時試験	0%	部外評価	0%
	報告書・レポート	0%	プレゼンテーション	0%	課題	0%		
	演習	30%	計	100%				
授業到達目標の達成度	量子化学という化学の分野でも難解の領域であり、本質的な理解には困難が伴う。しかし、大部分の学生には分子軌道法という現代化学の考えは最低限理解してもらえたと考えている。パソコンを使っの具体的な操作は出来ており、将来、何かの折に役立つことがあることを期待する。							
反省点	やはり、1部の学生には、量子化学の概念がほとんど理解できていないようであった。最低限の基本を絞り込み、それだけでもしっかり理解してもらえよう心がけたい。							
来年度の計画	さらに基本事項を絞り込み、パソコンを使った具体的な演習を増やしたい。							
授業評価アンケートに対するコメント	少人数だったこともあり、高い評価を得ることができたと考えている。							
履修登録者数	31名	定期試験 受験者数	31名	合格者数	31名	合格率	100%	