

科学と数理 (Mathematical Sciences)		1 年・前期・2 単位・選択必修 3 専攻共通 担当 小野 慎司
〔準学士課程(本科 1-5 年) 学習教育目標〕	〔システム創成工学教育プログラム 学習・教育目標〕 B-1 (70%), D-1 (30%)	〔J A B E E 基準〕 (c), (d-2a)
〔講義の目的〕 現在、我々の身の周りは電化製品で溢れている。その中の部品には様々な機能性材料が用いられており、その機能を担っているのは多くの場合、電子である。電子が材料中でどのように振る舞うのかを知ることが、機能性材料を有効に利用するために重要である。この電子の状態を把握するためには量子力学に基づく理解が不可欠である。 本講義ではまず初めに量子力学の基本について説明する。そしてこの方程式が実際にどのようなに使われるのかを解説する。原子、分子、固体に対しこの方程式を適用することにより固体中での電子状態のエネルギーはバンドになっていることを理解する。		
〔講義の概要〕 量子力学の基本を最初に説明し、最も重要なシュレディンガー方程式を導く。この方程式が材料中でどのように成立し、その結果電子がどのような状態（固有値、固有関数）にあるのかを理解する。最終的に固体中の電子状態がどのような状態にあるのか（金属、絶縁体、半導体）までを理解する。この分野の発展は凄まじく、コンピュータの進歩もあり第一原理計算とよばれる手法が多く用いられている。このような分野につながるような初歩の講義となるよう心掛けるつもりである。		
〔履修上の留意点〕 今まで本科で学んだ数学、物理、応用物理の知識が必要になる。苦手な分野がある場合、事前に復習しておくことを勧める。特にシュレディンガー方程式自身が微分を含んでいるため、微分積分の基礎をきちんと理解していることが求められる。さらに、行列、行列式も頻出するので、苦手意識がないよう復習に努めていただきたい。 量子力学は今まで学んだ古典力学とは異なり、通常我々が感じる常識が通じない考え方に出くわすことがある。そのよう学問で記述される微小世界の魅力を感じてほしい。		
〔到達目標〕 物質中の電子状態はどのようなになっているのかを理解する。		
〔評価方法〕 定期試験（70%）と講義中に出す演習課題（30%）によって評価する。		
〔教科書〕 化学のための初めてのシュレディンガー方程式 藤川高志 著 裳華房 〔補助教材・参考書〕 高校数学でわかるシュレディンガー方程式 竹内淳 著 ブルーバックス 量子力学入門 阿部龍蔵 岩波書店		
〔関連科目〕 本科で学んだ数学、物理、応用物理すべて。		

講義項目・内容

週数	講義項目	講義内容	自己評価*
第 1 週	講義の概要	講義の概要、評価等について説明する。	
第 2 週	量子力学の基礎	量子力学誕生の歴史、波を表す式（波動関数）、演算子	
第 3 週	量子力学の基礎	シュレディンガー方程式、存在確率、規格化、期待値	
第 4 週	量子力学の基礎	可換な演算子、ハイゼンベルグの不確定性原理	
第 5 週	一次元系	無限に深い井戸型ポテンシャル	
第 6 週	一次元系	1 次元調和振動子	
第 7 週	原子中の電子	水素原子	
第 8 週	原子中の電子	独立粒子近似、多電子原子、スピン、パウリの排他原理	
第 9 週	分子中の電子	H_2^+ と H_2 , 分子軌道, 等核 2 原子分子, フントの規則	
第 10 週	分子中の電子	異核 2 原子分子	
第 11 週	固体中の電子	1 次元結晶の電子論（エネルギーバンド、周期的境界条件）	
第 12 週	固体中の電子	1 次元結晶の電子論（金属、絶縁体、半導体）	
第 13 週	固体中の電子	有機分子の電子状態	
第 14 週	固体中の電子	タイトバインディング法、第一原理計算	
第 15 週	固体中の電子	実際の計算例（超イオン導電体の電子状態など）	
期末試験			

* 4 : 完全に理解した, 3 : ほぼ理解した, 2 : やや理解できた, 1 : ほとんど理解できなかった, 0 : まったく理解できなかった.
 (達成) (達成) (達成) (達成) (達成)