

## Quantum Chemistry

2 units (selection)

Eiji Kanazaki · PROFESSOR / PHYSICOCHEMICAL AND MATERIALS SCIENCE, DEPARTMENT OF CHEMICAL SCIENCE AND TECHNOLOGY

**Target)** 系を微視的に記述する方法について述べる。特に、原子や分子の電子構造を記述する為の基礎的な方法について述べる。シュレディンガー波動方程式以降の量子論の基礎概念を、系を拡張しながら順次、段階的に述べる。但し、水素原子の取扱いは、既に量子力学で学習済みなので、簡単に触れるに留め、分子についての記述を主にする予定である。基礎物理化学、物理化学両科目に引き続き、物理化学の学問体系の中で、もっとも新しく、今日盛んに拡張しつつある分野を理解する為の基礎的事項を述べる。時間の余裕があれば、分子の対称性の議論等についても触れたい。

**Outline)** 量子化学の基礎について述べる。

**Fundamental Lecture)** “Quantum Mechanics”(0.5), “Physical Chemistry”(1.0)

**Relational Lecture)** “Physical Chemistry”(0.5)

**Notice)** 英文の教科書を使用するので予習及び復習すること。パソコンで表計算し、結果をグラフ化する準備をしておくこと。講義の理解のためには、2時間の講義毎に、2時間の予習と2時間の復習とが必要である。

**Goal)**

1. 量子化学の基礎的概念を理解できる
2. 量子化学の基礎的概念を用いて簡単な系を記述できる
3. 実在の系について量子化学的推論ができる

**Schedule)**

1. About this lecture
2. chap.10 Atomic structure and atomic spectra, hydrogenic atoms
3. Radial solutions, atomic orbitals and their energies
4. Atomic orbitals, radial distribution function, p-orbitals
5. Spectroscopic transitions and selection rules
6. Structure of many electron atoms, orbital approximation
7. Pauli principle
8. Spectra of complex atoms, singlet and triplet states
9. chap.11 Molecular structure, Born-Oppenheimer approximation
10. Molecular orbital theory, hydrogen molecule-ion
11. Homonuclear diatomic molecules
12. Heteronuclear diatomic molecules
13. Molecular orbitals for polyatomic systems
14. Conjugated systems

15. chap.20 Materials 2: the solid state, electrical properties

16. Examination

**Evaluation Criteria)** ( ) 40 60

**Relation to Goal)** 本学科学習・教育目標 (A:○), (B:◎) に対応する。

**Textbook)** P. Atkins, J. Paula, Physical Chemistry, 9th ed., Oxford University Press, 2010. 改訂版が出たらそちらを教科書にします。

**Reference)** 講義の中で適宜紹介する。

**Contents)** <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=216468>

**Student)** Able to be taken by only specified class(es)

**Contact)**

⇒ Kanazaki (G516, +81-88-656-9444, kanazaki@chem.tokushima-u.ac.jp)

MAIL (Office Hour: 年度毎に学科の掲示板を確認すること)

**Note)** 授業予定は変更される場合がある