

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ため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、一電子原子、多電子原子、二原子分子及び多原子分子と物質系の大きさを順次拡張しながら、それぞれの系における取り扱いを順次段階的に述べる。基礎物理化学、物理化学の後を引き継いで、「物理化学」という巨大な学問体系の中で、最も新しく、且つ、今日活発に進歩し続ける量子化学を理解する為の基礎的な事項について述べる。時間の余裕があれば、電子と電磁波との相互作用或いは分子の対称性についても触れたい。教科書には、この分野で世界的に定評のあるアトキンスの著書を用いる。専門知識を英語で理解する力を函養することも本講義の目的の一つである。

Outline) 量子化学の基礎について述べる。

Fundamental Lecture) “Quantum Mechanics”(1.0)

Notice) 英文の教科書を使用するので予習をすること。パソコンを使った宿題を出すので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. 量子化学の基礎概念を理解できる
2. 簡単な系で量子化学的な記述ができる
3. 実在の系での量子化学的推論ができる

Schedule)

1. About this lecture
2. English textbook
3. hydrogen and hydrogenic atoms
4. atomic orbitals of hydrogenic atoms
5. radial distribution function
6. electronic transitions
7. orbital approximation
8. complexity in spectra
9. molecules
10. bonds and bonding orbitals
11. orbitals and energy calculations
12. polarity in the covalent bond
13. polyatomic molecules

14. frontier orbitals

15. bands in solids

16. E and E

Evaluation Criteria) 定期試験及び授業への取り組み状況及びレポートにより評価する。レポートの提出期限は次回の講義開始時刻である。期限以降に提出されたレポートは成績評価の対象にしない。最終評価における定期試験とそれ以外との割合は40対60である。

Textbook) W Atkins et al., Atkins Physical Chemistry, 9th ed., Oxford University Press 2010.

Reference) 講義の中で適宜紹介する。

Contents) <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=216469>

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を参照すること)

Note) 予習及び復習を欠かさず行なうこと。英和辞典を持参すること。授業計画は変更される場合がある。