

## 量子化学

## Quantum Chemistry

2 単位 (選択)

金崎 英二・教授 / 化学応用工学科 物質機能化学講座

**【授業目的】** ) 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。

**【授業概要】** 量子化学の基礎について述べる。

**【先行科目】** 『量子力学』(1.0)

**【履修上の注意】** 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。

**【到達目標】**

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

**【授業計画】**

1. 英語の教科書について
2. 再度英語について。
3. 水素と水素類似原子
4. 原子軌道
5. 量子化された軌道エネルギー
6. 電子遷移の選択則
7. 多電子原子
8. 多電子原子の電子スペクトル
9. 分子と量子化学
10. 化学結合
11. 簡単な分子の取扱い
12. 共有結合と電子対生成

13. 多原子分子

14. 共役二重結合とフロンティア軌道

15. 固体での分子軌道

16. 定期試験

**【成績評価基準】** 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。

**【教科書】** .W Atkins et al., Atkins Physical Chemistry, 9th ed., Oxford University Press 2010.

**【参考書】** 講義の中で適宜紹介する。

**【授業コンテンツ】** <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=216469>

**【対象学生】** 開講コース学生のみ履修可能

**【連絡先】**

⇒ 金崎 (化 516, 088-656-9444, [kanezaki@chem.tokushima-u.ac.jp](mailto:kanezaki@chem.tokushima-u.ac.jp)) MAIL (オフィスアワー: 年度毎に学科の掲示を参照すること)

**【備考】** 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。