

授業科目	量子化学
	Quantum Chemistry
担当者	教授 内藤 周式
単位	2
曜日・時限	金曜日2時限

[学習の教育目標]

応化、物生:D-2、E-3

到達目標

本授業科目の到達目標は、受講生が量子化学に関する基礎知識を習得し、それを応用できる能力を身に付けられることです。具体的には、①量子論的なものの考え方・概念を習得する、②簡単な量子力学的問題をとくことができる、③化学結合の成り立ちを量子化学的に理解する、ことが挙げられます。

授業内容

量子化学は、自然界において物質を支配する最も基本的な理論を取り扱う学問分野です。この講義では、量子化学の基礎とそれに基づいた化学結合論について学びます。まず量子力学の一般的成り立ちやその取り扱い法として簡単な波動方程式の解法について概説します。次に、それを用いた原子・分子の電子状態の理論的導出方法について述べ、周期律表との関係を説明します。また、分子軌道法・原子価結合法について学び、イオン結合・共有結合・配位結合など化学結合の理論的取り扱い方についても説明します。

授業計画

以下の計画に従って15回の授業を進めていきます。

1. 量子論の成り立ち
2. 水素原子のスペクトル
3. 光の粒子性・電子の波動性
4. シュレーディンガーの波動方程式
5. 箱の中の粒子の運動
6. 調和振動子と剛体回転子の運動
7. 水素原子の電子構造
8. 摂動近似法と変分近似法
9. 多電子原子の電子配置と周期律
10. 水素分子の構造
11. 原子価結合法 (VB法) と分子軌道法 (MO法)
12. 等核二原子分子と異核二原子分子
13. 多原子分子の構造
14. 混成軌道とヒュッケル分子軌道
15. 配位結合・金属結合

授業では、毎回授業内容に関する「講義資料のプリント」を配布するので、授業後に復習を必ず行うこと。また、プリントには次回授業内容も示されているので、指示に従って予習を必ず行うこと。

授業運営

量子化学は物質の成り立ちとその性質を理解するための基礎となる重要な学問分野です。その学習のためには数学や物理の基礎知識が不可欠ですので、これらの復習と毎回の講義の復習をするよう努力してください。講義では教科書は特に使用せず、授業計画に沿って板書やOHP・配布プリントにより分かりやすく説明し演習により理解度を深めます。原則として毎回簡単なスモールテストを実施します。前半と後半の2回、それまでの履修内容の理解度を高めるための演習問題を行い、その解説・質疑応答を行います。

評価方法

期末試験の成績を80%、毎回のスモールテストや2回の演習の結果を20%として総合評価します。

オフィスアワー

金曜日の2時限に教授室 (23-829) を訪問して下さい。講義内容の質問には講義中あるいは講義終了後に対応します。

参考書

ムーア (細谷治夫、湯田坂雅子訳) 『ムーア基礎物理化学—上・下』 2版 [東京化学同人]
 アトキンス (千原秀昭、秋葉章訳) 『物理化学要論—上・下』 [東京化学同人]