

電気通信大学 平成18年度シラバス

授業科目名	量子化学		
英文授業科目名	Quantum Chemistry		
開講年度	2006年度	開講年次	3年次
開講学期	5学期	開講コース・課程	昼間コース
授業の方法		単位数	2
科目区分	専門科目-学科専門科目-必修科目		
開講学科・専攻	量子・物質工学科		
担当教官名	樫森 与志喜		
居室	東6-726		

公開E-Mail	授業関連Webページ
kashi@pc.uec.ac.jp	

<p><b>【主題および達成目標】</b></p> <p>量子化学はその基礎を量子力学においているが、実際の原子や分子に応用した場合その方程式を厳密には解ける例は極めて少ない。したがって、様々な原子の構造や分子間の化学結合を考える際には、適切な近似法を用いなければならない。このように近似的に解を求めるとき、考えている系に対する化学的なイメージが大切になる。また、得られた近似解を解釈するにしても、その化学的な意味をよく吟味しなければならない。この意味で、量子化学は、単なる量子力学の応用問題ではなく、化学の一分野として独自の存在価値をもつことになる。この授業では、実際の原子、分子を例に取り、それらの方程式を、どのような方法で解くのか、また、得られた近似解は、どのような化学的意味を持つのかを考えながら、量子化学の基礎的な知識を解説する。この授業では、まず、多体問題の理解に始まり、変分法、摂動法の基礎を理解する。さらに、それらを2原子分子や多原子分子に適用し、これらを分子軌道法を使ってどのように解くのか、その方法論について習得する。</p>
---

## 電気通信大学 平成18年度シラバス

### 【前もって履修しておくべき科目】

基礎量子論、微積分、線形代数

### 【前もって履修しておくことが望ましい科目】

なし。

### 【教科書等】

「物理化学」(上)、マッカーリ、サイモン 著、千原秀昭、他訳、東京化学同人

### 【授業内容とその進め方】

講義は、おおむね、教科書の内容を中心に行う。

補足内容については、プリントを配布する。

主な内容は、

1. 水素原子
2. 水素様原子、スピン、電子配置
3. 近似法：摂動論と変分法、He原子への適応
4. 多電子原子：SCF法
5. 2原子分子の化学結合：分子軌道法  
LCAO - MO法、 $H_2^+$ ,  $H_2$ , 等核二原子分子、異核二原子分子  
SCF-LCAO-MO法
6. 多原子分子  
混成軌道

共役炭化水素、芳香族炭化水素、パイ電子近似、ヒュッケル法、

3中心2電子結合、水素結合

7. 計算量子化学

半経験的SCF法

非経験的方法、ab initio法

8. 群と量子化学

9. 化学反応と量子化学

適宜、授業中に問題演習を行う。

問題演習は、自分の理解不足を発見するよいチャンスを与えてくれる。

また、演習問題を自力で解くことによって、自信を得、さらなる興味が

わいてくる。

【成績評価方法及び評価基準(最低達成基準を含む)】

主に期末試験と出席によって決める。

評価基準

(1) 変分法の理解(永年方程式を作ることができその意味を理解できる)。

(2) 多電子原子について基礎的なことを理解している。

(3) 分子軌道の基礎として、2原子分子(等核、異核)の分子軌道関数

について理解している。

(4) 多原子分子について混成軌道を理解する。また、ヒュッケル法を使って

## 電気通信大学 平成18年度シラバス

簡単な共役分子の分子軌道、エネルギーの計算ができる。

### 【オフィスアワー：授業相談】

特に決めてはいませんが、事前に必ずメールでアポイントをとって下さい。なんでも相談にきて下さい。

### 【学生へのメッセージ】

よりよい授業をつくるには、教師の一方通行ではなく、学生の積極的な参加が必要です。授業中には、どんどん質問をして自主性をもって授業にのぞんでください。

### 【その他】