

量子化学特論

2 単位 (選択)

Advanced quantumchemistry

金崎 英二・教授 / 環境創生工学専攻 化学機能創生コース 物質機能化学講座

【授業目的】 量子化学を基礎とする分子科学の諸分野における理論及び実験研究における話題を述べる。分子分光光学に重点を置き、分子構造及び分子物性との関連についても述べる予定である。

【授業概要】 電場、磁場及び光力場等の外部場下での分子及び分子集合体の電子状態の基礎を分光光学等の視点から議論する。時間が許せば他の話題、例えば二重共鳴についても含める予定である。

【授業形式】 講義

【キーワード】 分子分光光学

【先行科目】 『量子化学』 (1.0), 『物理化学』 (1.0)

【関連科目】 『化学機能創生輪講及び演習』 (0.5), 『化学機能創生特別実験』 (0.5)

【到達目標】 量子化学の最新の議論が理解できる

【授業計画】

1. 量子化学特論について
2. 量子化学の基礎概念
3. 量子化学の基礎的方法
4. 拡張した概念
5. 拡張した方法
6. 分子の電子状態の基礎概念
7. 分子電子状態の拡張した概念
8. 分子の電子状態の基礎的研究方法の概要
9. 分子の電子状態の基礎的研究方法
10. 分子の電子状態の基礎的研究方法の拡張
11. 外部場と分子の相互作用の初歩
12. 外部場と分子の相互作用の概念
13. 相互作用計算の基礎的知識
14. 相互作用計算の基礎的知識の拡張
15. 相互作用計算の基礎的知識の更なる拡張
16. 定期試験

【成績評価基準】 レポート提出を求め、平常点を考慮して評価する

【教科書】 ATKINS, PHYSICAL CHEMISTRY, 9th ed., 2010, Oxford University Press.

【授業コンテンツ】 <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=216910>

【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) MAIL (オフيسアワー: 学科の掲示を参照すること)