

## 物理化学 II

2 units (selection) 2nd-year(2nd semester)

Takashi Yamamoto · ASSOCIATE PROFESSOR / DEPARTMENT OF CIVIL AND ENVIRONMENTAL STUDIES

**Target)** 物理化学 I では熱力学をもとにして、分子を構成単位とする物質の化学反応および物質の状態の変化などについて説明するのに対して、物理化学 II では量子力学をもとにした原子の電子配置、化学結合、分子の構造、電磁波と物質の相互作用について説明する。

**Outline)** 先ず、物質を構成するミクロな粒子である原子や分子の性質を学習する。ついで、それらが凝集した液体と固体の状態について学習する。

**Keyword)** *atomic structure, molecular orbital method, molecular spectroscopy, 溶液の構造, 固体の構造*

**Fundamental Lecture)** “*化学の基礎*”(1.0)

**Notice)** 予習をしていることを前提に授業を行う。

**Goal)**

1. 原子軌道について理解している。
2. 分子軌道法について理解している。
3. 分光学の原理について理解している。
4. 液体、溶液に関する基礎的な内容について理解している。
5. 結晶、固体に関する基礎的な内容について理解している。

**Schedule)**

1. 量子力学の起源について講義する。
2. シュレディンガー方程式と波動関数 について講義する。
3. 量子論 (1): 並進運動と振動運動 について講義する。
4. 量子論 (2): 回転運動と近似の手法 について講義する。
5. 水素型原子の構造とスペクトルについて講義する。
6. 多電子原子の構造と近似法について講義する。
7. 一重項状態と三重項状態、スピン-軌道相互作用について説明する。
8. 中間試験
9. ボルン-オッペンハイマー近似と原子価結合法について講義する。
10. 分子軌道法について講義する
11. ヒュッケル分子軌道法 について講義する。
12. 対称操作と対称要素、分子の対称による分類について講義する
13. 指標表と対象の記号付けについて講義する
14. 回転スペクトルと振動スペクトルについて講義する
15. 電子遷移について講義する
16. 定期試験

**Evaluation Criteria)** 試験を実施する。

**Re-evaluation)** 一定の基準を満たしている場合に再試験を行う。

**Textbook)** アトキンス 物理化学(上)

**Reference)** 量子化学—基本の考え方 16章

**Contents)** <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=218981>

**Contact)**

⇒ Yamamoto (+81-88-656-7263, t-yamamo@ias.tokushima-u.ac.jp) MAIL