2019 年 3Q(LAS.C105) **量子化学基礎**（金曜 3,4 時限）　F クラス 担当：長村（おさむら）

メールアドレス ： osamura@j07.itscom.net

教科書「理工系学生のための基礎化学　量子化学 第 3 版」１章～７章

宇宙を構成している物質、生命体や私達の体を構成している物質、身の回りにある物質、自然界に存在するもの、人間が作り出したもの、それらはすべて原子や分子からできている化学物質である。本講義では、物質の構造や、性質、反応などを考える上でもっとも基礎となる分子の結合状態を理解するために必要な理論的内容（量子化学による化学結合の基本的概念）を学ぶ。それによって、原子や分子の姿が明らかになり、物質の基本単位としての分子が身近な存在であることがわかるであろう。主な内容は以下の通りである。

**１．量子力学への道**

1.1 Rutherford の実験
1.2 黒体放射
1.3 光電効果
1.4 光の波動性と粒子性
1.5 電子の粒子性と波動性
1.6 de Bloglie 波長
1.7 Heisenberg の不確定性原理
1.8 光の吸収と発光
1.9 電磁波の種類
1.10 水素原子の発光スペクトル
1.11 箱の中の粒子

**２．水素原子**

2.1 水素原子のエネルギー準位
2.2 シュレーディンガー方程式
2.3 量子数
2.4 水素原子の波動関数
2.5 s 軌道
2.6 p 軌道
2.7 d 軌道
2.8 電子密度

**３．多電子原子**

3.1 原子のエネルギー準位
3.2 電子スピン
3.3 電子配置
3.4 構成原理
3.5 Pauli の排他原理
3.6 Hund の規則
3.7 原子の周期性
3.8 原子価軌道と内殻軌道
3.9 原子価電子と内殻電子

**４．化学結合**

4.1 原子価結合法
4.2 分子軌道法
4.3 結合性軌道と反結合性軌道
4.4 水素分子の結合状態
4.5 結合次数
4.6 結合の極性
4.7 共有結合とイオン結合
4.8 等核二原子分子
4.9 σ 軌道と π 軌道
4.10 混成軌道
4.11 π 共役系

**授業および試験時には、電卓を持参してください。**
**各回の授業資料・スライドは、後日 OCWi にアップします。**
**成績評価は、平常点(25%)と期末試験(75%)とします。**
**平常点は、練習問題、課題、予習提出物により評価します。**

■化学の講義内容に関する疑問・質問に、教員と大学院生が答える「化学相談室」が開催されますので、利用して下さい。　開催場所： 図書館 3 階　グループ研究室 4　、日時： 化学科 HP、図書館 HP、掲示等で確認
問合せ先： 化学系事務室　本館 1 階 H170 号室

## はじめに

原子はどの様なものであるのか、原子からどのようにして分子が形成されるのか、そしてその分子の構造はどのようにして決まっているのか、どうしていろいろな原子の組み合わせで分子ができるのか、身の回りにある物質の性質が分子の性質とどのように関係しているのか、などを理解するためには、原子や分子の中に存在する電子の役割について学ぶ必要がある。そこでは、どうしてもミクロな世界に働く原理を用いなければならず、電子は粒子というよりも、むしろ波としての性質を持つことによる量子論的記述が必要になってくる。それが、電子の運動状態を記述する Schrödinger 方程式と、その解として得られる波動関数という数学的な形で記述されるのであるが、どうしてもなじみにくいものとなっている。方程式を解くには高度な数学が必要であり、その意味については量子力学を勉強する必要があるが、本講義では、それらを見える形で表し、原子や分子に応用していく部分を学ぶことにする。分からないことは、遠慮せずどんどん質問をして下さい。メールでもかまいません。

## 参考図書

「フレッシュマンのための化学結合論」　ISBN:4-7598-0775-6　(1996)　図書番号 431.12/W
M. J. Winter 著／西本　吉助訳　出版社:化学同人　価格：¥2,310
本書は、古典的化学結合論（ルイスの化学結合論）と、新しい化学結合理論（量子化学的化学結合論）の橋渡しを担う、初心者向けテキスト・参考書. 最新の研究情報を取り入れながら、数学を使わずに化学結合の諸概念を明快にわかりやすく解説。また、無機化学を理解するための基本となる概念や原理の説明を盛り込んでいる。章末問題解答付き。　主要目次：原子の構造／電子式／２原子分子／VSEPR 法／混成オービタル／多原子分子

「絵とき化学結合の見方・考え方」　ISBN:4-274-11969-6　(1987)　図書番号 431.12/H
藤谷　正一・木野邑　恭三・石原　武司共著　出版社:オーム社　価格：¥3、570
本書は、化学にはじめて出会う人たちにも理解しやすい内容で、化学結合、すなわち、物質が生成するとき、原子やイオンがどのように結び付いていくのか、そのしくみについて学ぶことを目的としたものである。　主要目次：化学結合の基礎／原子の構造／共有結合／イオン結合／金属結合／物質の性質／化学反応

「量子化学-基本の考え方 16 章」　ISBN:4-8079-0433-7　(1995)　図書番号 431.19/N
中田宗隆著　出版社:東京化学同人　価格：¥2,400
初めて化学の基礎にあたる量子化学を学ぼうとする学生にも理解できるよう、基礎的な事項を 16 章に分けてわかりやすく解説している。章末問題も付いている。　主要目次：黒体放射と電磁波／光電効果／原子スペクトル／原子の模型／物質波／シュレディンガーの波動方程式／水素原子の波動関数／電子スピンと角スピン／イオン化エネルギー／パウリの排他原理とフントの規則／水素分子とヘリウム分子／等核二原子分子と結合次数／異核二原子分子と双極子モーメント／電子状態と電子スペクトル

「理系なら知っておきたい化学の基本ノート（物理化学編）」　ISBM:　4806119385　(2003)　図書番号 430/0/1
岡島 光洋著　出版社: 中経出版　価格：￥1,680
代ゼミ超人気講師が高校の化学と大学の化学のギャップをうめるために書いた分かりやすい解説書。原子、分子の構造から化学結合、化学熱力学、化学平衡まで、楽しく勉強できるような工夫がされている。　主要目次：原子の構造と電子配置／周期律／原子の結合／原子の結合／分子の構造と性質／化学反応とエネルギー／物質の状態