

化学結合の量子化学

中嶋 隆人¹

1: 理化学研究所 計算科学研究機構 (nakajima@riken.jp)

天然に存在する元素の数は 90 種類程度であるが、私たちが目にする物質の種類は膨大な数となる。この多様性は原子と原子が結合して、もとの元素とは異なる新しい性質を持つ分子を形成することに由来する。分子の多様性を担うのが化学結合である。一言で化学結合と言っても、その起源の違いによって色々な種類の結合形態が考えられる。

本講義では、修士・博士課程の学生と若手研究者をターゲットとし、量子化学を勉強していない方々でも理解できるように、化学結合の基礎を中心に勉強する。加えて、最新の私たちのグループの研究成果を紹介する予定である。講義内容は以下のとおりである。

1. 分子と化学結合
2. 化学結合と量子力学
3. 化学反応から結合を理解する
4. 分子間相互作用を理解する
5. 化学結合に対する相対論効果
6. 弱い相互作用からなる超分子錯体に対するシミュレーション