科目ナンバリング			
授業科目名 <英訳>	基礎物理化学（量子論） Basic Physical Chemistry(quantum theory)	担当者所属 職名・氏名	理学研究科　准教授　足立　俊輔 理学研究科　教授　竹腰　清乃理 理学研究科　教授　林　重彦

群	自然科学科目群	分野(分類)	化学(基礎)	使用言語	日本語

旧群	B群	単位数	2単位	週コマ数	1コマ	授業形態	講義（対面授業科目）

開講年度・開講期	2024・前期	曜時限	水2	配当学年	主として1回生	対象学生	理系向

[授業の概要・目的]

理科系学生を対象とする（理学部１回生のクラス指定科目である）。
微視的世界の運動法則である量子力学の基礎と、その化学への応用である量子化学の基本事項を講義する。原子の内部構造や、分子における化学結合、分子構造などが、量子力学に基づいてどのように理解されるかを学ぶ。現代的な物質科学の根底をなす重要な基礎概念として、有意義な理論体系と知識を習得することを目的とする。

[到達目標]

・量子力学による分子や電子の記述についての基本事項を習得する。
・波動方程式から電子の状態や空間分布を導く過程について理解する。
・原子軌道や分子軌道の概念を理解する。
・分子軌道がどのように組み立てられるかを理解し、化学結合や分子構造との関係を説明できるようになる。

[授業計画と内容]

以下は目安であり、詳細は担当教員によって異なる。初回のガイダンスで確認すること。
１．古典力学による分子の記述（２～３回）
　　二原子分子のばね＆棒モデル、自由度、運動方程式、角運動量、調和振動
２．原子の構造～量子論（２～３回）
　　原子スペクトル、ボーアの原子模型、粒子の二重性
３．波動方程式と運動の量子化（２～３回）
　　波動関数、ボルンの解釈、並進・振動・回転の量子化
４．水素類似原子の電子状態（１～２回）
　　動径部分・角度依存部分、電子の軌道
５．多電子原子（１～２回）
　　ハートリー近似とパウリの排他原理、電子配置、周期性、イオン化エネルギー、電気陰性度、電子親和力
６．化学結合（２～３回）
　　共有結合とイオン結合、分子軌道、LCAO近似、混成軌道

[履修要件]

高校物理（力学、波動など）を履修していると一層興味深く感じると期待されるが、基本的には異なる理論体系なので、特に必須の要件ではない。

[成績評価の方法・観点]

授業中の演習あるいはレポート課題を25%、定期試験を75%として評価する。

基礎物理化学（量子論）(2)へ続く↓↓↓

基礎物理化学（量子論）(2)

[教科書]

使用しない

[参考書等]

（参考書）
マッカーリ、サイモン『物理化学 - 分子論的アプローチ(上)』（東京化学同人）ISBN:4807905082
アトキンス『アトキンス 物理化学（上）』（東京化学同人）ISBN:4807905295
高塚和夫『化学結合論入門』（東京大学出版会）ISBN:9784130625067

[授業外学修（予習・復習）等]

授業計画を参考に、上に挙げた参考書の対応する部分を予習しておくこと。
復習に関しては、レポート問題だけではなく、参考書の章末問題を解くことを薦める。

[その他（オフィスアワー等）]