Course number	U-LAS13 10005 LJ60		
Course title (and course title in English)	基礎物理化学（量子論） Basic Physical Chemistry(quantum theory)	Instructor's name, job title, and department of affiliation	Graduate School of Science Professor,HAYASHI SHIGEHIKO Graduate School of Science Associate Professor,ADACHI SYUNSUKE Graduate School of Science Professor,TAKEGOSHI KIYONORI

Group	Natural Sciences	Field(Classification)	Chemistry(Foundations)

Language of instruction	Japanese	Old group	Group B	Number of credits	2

Number of weekly time blocks	1	Class style	Lecture (Face-to-face course)	Year/semesters	2024・First semester

Days and periods	Wed.2	Target year	Mainly 1st year students	Eligible students	For science students

[Overview and purpose of the course]

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。

[Course objectives]

・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。

[Course schedule and contents)]

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

Continue to 基礎物理化学（量子論）(2)↓↓↓

基礎物理化学（量子論）(2)

[Course requirements]

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。

[Evaluation methods and policy]

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。

[Textbooks]

Not used

[References, etc.]

（References, etc.）

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

[Study outside of class (preparation and review)]

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。

[Other information (office hours, etc.)]