科目ナンバリング	U-LAS13 10005 LJ60				
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　教授　　渡邊　一也	
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	2026・後期	曜時限	水4	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]

19世紀末における実験技術の発達により、古典論では説明できない現象が次々と発見された。量子力学はそれらの新奇な物理現象を原子・分子レベルの描像に基づいて矛盾なく説明する体系として、20世紀前半に急速に発展した。量子化学は、量子力学に基づいて原子の構造、あるいは分子の化学結合を記述する物理化学の一分野であり、分子の物性や構造およびその反応性を理解するための基礎となる学問である。本講義では、量子論の入門としてその概要を解説し、必須の概念である波動関数について、簡単なモデルにおけるその振る舞いを通して理解する。その後、量子論的な波動関数の概念に基づいて原子の構造や分子中の化学結合を理解することを目的とする。

[到達目標]

（1）量子力学が生まれた背景、およびその基礎的な概念を理解し、粒子－波動二重性など量子論特有の物理原則を説明できるようになる。
（2）微視的粒子の簡単な運動について、シュレーディンガー方程式の解がどのような特徴をもつか説明できるようになる。古典力学と比較することにより、量子化の概念を理解する。
（3）原子の電子構造をあらわす軌道関数（オービタル）の概念を理解し、これを用いて原子中の電子構造を記述できるようになる。
（4）分子軌道法を用いて原子間で形成される化学結合の概要を理解する。

[授業計画と内容]

下記の項目について、フィードバックを含め全15回で、併記したコマ数程度で説明を行う。
（1）量子論への導入：　量子力学の起源と重要な概念を説明する（3回程度）。
・量子論の歴史、原子モデルの構築、エネルギーの量子化、波－粒子の二重性、波動関数
（2）運動の量子論：　ミクロな粒子の量子論的な取り扱い方を学ぶ（3～4回程度）。
・シュレーディンガー方程式、並進運動、振動運動、回転運動
（3）原子の構造とスペクトル：　水素原子および多電子原子の電子構造、特に軌道関数の概念を量子論に基づいて理解する（3～4回程度）。
・水素原子、多電子原子、原子スペクトル
（4）分子構造：　軌道関数の概念を基に分子の電子構造の記述の仕方を学ぶ（4回程度）。
・原子価結合法、分子軌道法、二原子分子、多原子分子

講義は参考書『アトキンス 物理化学(上)』の内容に対応するテーマをとりあげ、重要な基本事項に関して解説を行う。
フィードバック時間は研究室内にて、自習に基づいて質問に来た学生に対して説明する。

[履修要件]

前期（熱力学）・後期（量子論）の連続履修を推奨する

基礎物理化学（量子論）(2)へ続く↓↓↓

基礎物理化学（量子論）(2)

[成績評価の方法・観点]

平常点25%（レポート課題あるいは授業中の演習）、および期末筆記試験75%の割合で評価する。

[教科書]

使用しない。講義資料はオンライン配布などの方法で適宜提供する。

[参考書等]

（参考書）

P. W. Atkins, J. de Paula, 中野元裕ら訳 『アトキンス 物理化学(上) 第10版』（東京化学同人）ISBN: 9784807909087

[授業外学修（予習・復習）等]

各単元について、どのような概念を学習するかについて簡単に予習することが望ましい。復習は例題の解答や、巻末問題の解答を含めて参考書を参照し、予習よりも時間を使って新しい概念を理解することが望ましい。

[その他（オフィスアワー等）]

クラス指定科目である。指定のクラスは無条件で履修を許可する。それ以外の履修希望者については抽選で総計100名まで受け入れる。

[主要授業科目（学部・学科名）]

理学部