授業科目名	量子化学 I （ Quantum Chemistry I ）					
担当教員名	松本　剛昭 （ MATSUMOTO Yoshiteru ）			所属等	学術院理学領域	
				研究室	総 512	
分担教員名						
クラス	理学専門科目	学期	後期		必修選択区分	必、選択
対象学年	2 年	単位数	2	曜日･時限	水 3･4	
キーワード	波動関数、シュレーディンガー方程式、箱の中の粒子、調和振動子、回転の量子化					
授業の目標	量子力学の歴史を紐解きながら、ミクロな物質の運動を記述するシュレーディンガー方程式の概念と、これを解いて得られる波動関数を理解する。また、不確定性原理やトンネル現象などの量子力学特有の考え方を習得し、ミクロな世界における物質観を身につける。					
学習内容	電子や原子核のようなミクロな粒子の運動は、量子力学によって記述される。本講義では、化学の対象である原子や分子の構造を量子力学的に理解するための基礎的方法論を学習する。始めに、波と粒子の二重性に基づいて、粒子運動がシュレーディンガー方程式で記述されることを学ぶ。次に、これを解いて得られる波動関数とエネルギー準位を様々な運動形態に応じて概観し、実在の原子分子の性質が量子力学で説明されることを学ぶ。					
授業計画	1. 量子化学 I を開講するにあたって：ガイダンス「量子化学を学ぶ理由」 2. 量子力学の起源：エネルギーの量子化 3. 量子力学の起源：波ー粒子二重性 4. ミクロな系の力学：シュレーディンガー方程式 5. ミクロな系の力学：波動関数のボルンの解釈、確率密度 6. 量子論の原理：演算子、重ね合わせと期待値 7. 量子論の原理：不確定性原理 8. 並進：一次元での自由な運動、一次元の箱の中の粒子 9. 並進：二次元および多次元の箱の中の運動 10. 並進：トンネル現象（オンデマンド型授業） 11. 振動運動：調和振動 12. 振動運動：振動子の性質 13. 回転運動：二次元の回転 14. 回転運動：三次元の回転における波動関数 15. 回転運動：三次元の回転における角運動量					
受講要件	古典力学、簡単な微積分・三角関数に関する知識					
テキスト	P. W. Atkins, J. de Paula 著，中野元裕・上田貴洋・奥村光隆・北河康隆 訳，アトキンス 物理化学（上）第 10 版，東京化学同人，2017，9784807909087，定価 6,270 円（本体 5,700 円+税）					
参考書	・真船文隆 著，量子化学　基礎からのアプローチ，化学同人，2007，9784759810844，定価 3,960 円（本体 3,600 円＋税） ・D. A. McQuarrie, J. D. Simon 著，千原秀昭・江口太郎・齋藤一弥 訳，物理化学（上）分子論的アプローチ，東京化学同人，9784807905089，定価 5,940 円（本体 5,400 円＋税） ・T. Engel, P. Reid 著，稲葉章 訳，物理化学（上），東京化学同人，9784807908639，定価 6,380 円（本体 5,800 円＋					
予習・復習について	各回の講義で取り扱う内容について、テキストの該当箇所を熟読することで予習と復習を行うこと。さらに、講義毎に与える演習問題に各自が積極的に取り組み知識と思考力の定着を図ること。					
成績評価の方法・基準	筆記試験 80%、毎回の小テスト・課題 20%					
オフィスアワー	時間は特に定めていません。いつでも質問してください。研究室に来訪しての質疑応答を希望する場合、事前に電子メールで連絡した後に日程調整をします。					
担当教員からのメッセージ	ミクロな粒子運動を記述するシュレーディンガー方程式が理解できれば、分子を形成する原子核や電子の運動の様子が手に取るようにわかります。そんな量子化学を自由自在に操ることができれば、様々な分野の化学を根本的に見つめることができるはずです。量子化学は議論すればするほど身につきますので、質問に来てもらうのは大歓迎です。					