

登録コード	SC416200	開講年度	2026				
授業題目	物理化学 I					担当教員	濱崎 亜富
英文授業名	Physical Chemistry I					副担当	
単位数	2	講義期間	前期	曜日・時限	火曜・2時限	対象学年	2年
講義室	理学部第12講義室		授業形態	講義	遠隔授業科目	備考	
信大コンピテンシー 該当							
(1)授業の達成目標	授業で得られる「学位授与の方針」要素				⇔	【授業の達成目標】	
	26Sカリ, 25Sカリ, 24Sカリ, 23Sカリ						
	【2023年度以降カリキュラム対象】理学の各分野における専門知識				⇔	原子や分子の成り立ちや、化学反応のメカニズムについて、理論的かつ数学的に理解し、化学的な現象を思考できるようになることを目指す。	
	【2023年度以降カリキュラム対象】専門知識や観察・実験などによって問題を理解・解決し、その成果を的確に他者に伝える力				⇔	身の回りの現象と量子化学をつなぎ合わせられる力を身につける。	
(2)授業で学べる「テーマ」	その他						
(3)全学横断特別教育プログラム							
(4)授業の概要	分子に対するシュレーディンガー方程式をたて、それを解くための近似法を学ぶ。数学的困難のために波動方程式の近似解で満足せざるを得ない現状であることを知る。次に、分子の性質や反応性を量子化学の立場から再認識する。これによって、代表的な分子軌道法を中心に2原子分子や簡単な分子の分子軌道の形とエネルギー固有値とを求める。これらに基づいて、分子の対称性と反応性および分子の性質と化学結合、反応速度と遷移状態について言及する。						
(5)授業のキーワード	分子、シュレーディンガー方程式、近似解法、化学結合、反応性、分子軌道、スピン						
(6)授業計画	1. 基礎物理化学の復習と物理化学Iの概要 2. 分光学, NMR, ESR 概論 1 3. 分光学, NMR, ESR 概論 2 4. 調和振動子と実在分子の振動 5. 剛体回転子と実在分子の回転 6. 多電子系をどのように扱うか (5～11 までのイントロ) 7. 多電子原子 摂動法 8. 多電子原子 変分法 1 9. 分子軌道法 1 10. スレーター行列 11. 分子軌道法 2 12. 多電子原子 変分法 2 13. ヒュッケル近似 (非局在系), 永年行列式 (ブタジエン, ベンゼン) 14. 分子の磁気共鳴 (NMR, ESR) 15. 反応速度						
(7)成績評価の方法	出席時間が実施授業時間の7割以上の場合に試験 (最終) を受験できる。 試験は、総点を100として60点以上で合格とする。 授業内与えられた課題 (確認テスト, レポート) も、成績の参考にする場合がある。						
(8)成績評価の基準	試験成績の目安：秀 90点以上 優 80点以上 良 70点以上 可 60点以上 不可 59点以下 課題評価について：テストやレポートは自身の確認のためであるので、自らの理解度を深めるためのものと考えること。ただし、白紙かそれに近い解答用紙を提出した場合、提出したと認めない場合があるので注意すること。授業時間内に行われるテスト, レポートを提出しない場合, あるいは白紙かそれに近いものを提出した場合, 当該授業への出席も認めない (欠席扱いとする)。						
(9)事前事後学習の内容	授業に対応する事柄について、教科書や参考書で予習、復習に取り組むこと。授業中に課す演習問題の復習をすること。						
(10)履修上の注意	予め関連する事項を読んでおく。						
(11)質問,相談への対応	授業終了後、およびそのときに約束した時間に対応する。 メールでも対応可。						
【教科書】	物理化学 (上) マッカーリ・サイモン 東京化学同人 物理化学 (下) マッカーリ・サイモン 東京化学同人						
【参考書】	物理化学 (上) アトキンス 東京化学同人 物理化学 (下) アトキンス 東京化学同人						

【参考書】	量子物理化学 大野公一 東京大学出版会 化学者のための数学十講 大岩正芳 化学同人 初等量子化学 -その計算と理論 大岩正芳 化学同人
-------	---