

物質構造化学 (Structural Chemistry of Materials)		4 年・通年・2 学修単位(β)・選択 物質化学工学科(化学応用工学コース) 担当 松浦 幸仁
[準学士課程(本科 1-5 年) 学習教育目標] (2)	[システム創成工学教育プログラム 学習・教育目標] D-1 (80%)、B-1 (20%)	[JABEE 基準] (d-2 a), (c)
[講義の目的] 物性を理解するためには量子力学・統計熱力学の知識が不可欠である。本講義では、量子力学で記述される電子・原子のふるまいを学習した後に、それらの原理を応用した分光光学および統計熱力学について習得する。		
[講義の概要] 前期：量子力学の基礎について学習する。 後期：分光光学・統計力学の基礎について学習する。		
[履修上の留意点] 数学や物理の知識が必要になるので、低学年で習った微積分、代数幾何、古典力学などを見直しておくこと。		
[到達目標] 前期前半：量子論の概念と原子軌道が理解できる。 前期後半：化学結合と分子軌道が理解できる。 後期前半：分光光学の基礎が理解できる。 後期後半：統計熱力学の基礎が理解できる。		
[自己学習] シュレディンガー方程式の解法などは図書館で演習書などを参考にして自分で解いてみる。		
[評価方法] 定期試験の平均で評価する。授業態度が不良で、学ぶ意志が欠如している場合には減点を行う。		
[教科書] アトキンス物理化学(上)(下) 千原、中村訳 東京化学同人 [補助教材・参考書]		
[関連科目] 3 年次の「無機化学」と「物理化学」		

講義項目・内容

週数	講義項目	講義内容	自己評価*
第1週	量子論：序論と原理	量子力学の起源、微視的な系の力学	
第2週	量子論：序論と原理	量子力学的原理	
第3週	量子論：手法と応用	並進運動	
第4週	量子論：手法と応用	振動運動、回転運動、スピン	
第5週	原子構造と原子スペクトル	水素型原子の構造とスペクトル	
第6週	原子構造と原子スペクトル	多電子原子の構造	
第7週	原子構造と原子スペクトル	複雑な原子のスペクトル	
第8週	演習	量子論、原子構造の復習	
第9週	分子構造	ボルンオッペンハイマー近似	
第10週	分子構造	分子軌道法：水素分子イオン	
第11週	分子構造	分子軌道法：等核二原子分子	
第12週	分子構造	分子軌道法：変分原理	
第13週	分子構造	多原子分子系の分子オービタル	
第14週	分子の対称	分子軌道と分光学への応用	
第15週	演習	分子構造、分子の対称の復習	
前期期末試験			
第16週	回転および振動スペクトル	回転スペクトル	
第17週	回転および振動スペクトル	二原子分子の振動、多原子分子の振動	
第18週	電子遷移	電子遷移の特性：2原子分子および多原子分子の電子スペクトル	
第19週	電子遷移	電子励起状態：蛍光とリン光	
第20週	磁気共鳴	磁場が電子や原子核に及ぼす効果	
第21週	磁気共鳴	核磁気共鳴	
第22週	磁気共鳴	電子スピン共鳴	
第23週	演習	分光学の演習	
第24週	統計熱力学：概念	分子状態の分布	
第25週	統計熱力学：概念	内部エネルギーとエントロピー	
第26週	統計熱力学：概念	カノニカル分配関数	
第27週	統計熱力学：応用	分子分配関数	
第28週	統計熱力学：応用	統計熱力学の応用	
第29週	統計熱力学：応用	統計熱力学の応用	
第30週	演習	統計熱力学の復習	
学年末試験			

* 4：完全に理解した， 3：ほぼ理解した， 2：やや理解できた， 1：ほとんど理解できなかった， 0：まったく理解できなかった。
 (達成) (達成) (達成) (達成) (達成)