

構造解析学 (Structural Analysis)		4年・後期・2学修単位()・必修 物質化学工学科・担当 片倉 勝己	
〔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(100%)	〔JABEE 基準〕 d2-a, d2-c	
〔講義の目的〕 固体状態における化学物質の種々の形態とその形態がもたらす性質について、構造面(原子・イオン・分子の規則配列)と関連づけて理解するとともに、X線による固体構造の解析法の原理面および実際面について理解する。			
〔講義の概要〕 対称性について教授した後、結晶構造の分類や三次元周期構造について概説したのちX線回折法の原理と解析法について教授する。また、主たる結晶構造の特徴や用途について具体例を示しながら教授してその理解を深め、固体状態にある物質の性質について考察する。			
〔履修上の留意点〕 固体構造を物理化学的観点から学習するが、三次元周期構造をイメージだけでなくフーリエ解析等の数学的手法も交えて取り扱うので、数学や物理の復習を充分に行っておくとともに、その本質を捉えて学習する姿勢が重要である。さらに、近年幅広く利用されている種々の酸化物の性質をその構造から理解するための基礎でもあるから、固体材料の有用性とその性質に興味を持つことも、理解の助けにつながる。			
〔到達目標〕 後期中間試験： 群論の概要とつかんで分子を点群に分類する。分子の対称操作をイメージして、群の掛算表との相互変換ができる。指標表中の直交性を応用して、分子の自由度を判別する。対称性に基づいて結晶系とブラベ格子で結晶を分類できる。結晶面とミラー指数の相互変換ができる。ブラッグ条件を証明できる。 学年末試験： X線回折パターンからブラベ格子と格子定数が算出でき、物質の密度を見積もることができる。代表格子の結晶構造因子を誘導して、系統的消滅則と関連付けができる。格子周期性に基づいたフーリエ解析の意義を理解する。結晶の格子エネルギーを式で誘導できる。イオン性結晶におけるポーリングの法則が説明できる。代表的な結晶構造を説明できる。格子欠陥の種類を説明できる。機能性結晶材料の代表例と特徴を説明できる。			
〔評価方法〕 2回実施される定期試験の単純平均を60%、レポートおよび演習課題への取り組みを40%加味して、総合的に判断する。			
〔教科書〕『パーロー物理化学 第6版下巻』大門 寛ら訳 東京化学同人。 〔補助教材・参考書〕 「分子の対称と群論」東京化学同人、「固体物理学入門」(キッテル、丸善) アトキンス物理化学、シュライバ無機化学等の専門書や結晶学や固体化学の入門書と数学の教科書も参考にされたい。			
〔関連科目〕 構造解析学は、「物理」「物理化学」、「無機化学」における固体の性質や構造と密接に関連しており、「機器分析化学」における重要分野のひとつでもあるX線回折法の基礎から応用も含んでいる。また、数学的な取り扱いも伴うので、数学への理解も重要である。			

講義項目・内容

週数	講義項目	講義内容	自己評価*
第1週	ガイダンス 分子の対称性と点群	ガイダンスおよび対称要素と対称操作 様々な分子の対称性と点群 (シェーンフリース表記)	
第2週	群論と点群	群の定義、掛算表、位数 分子の対称操作と掛算表、双極子モーメントとキラル性の判定	
第3週	群と指標表と 点群の応用	指標表の作り方と、指標の直交性 指標表の見方と分子の自由度予想への応用	
第4週	結晶の概要と結晶格子	結合の差による結晶の種類とその特徴 7結晶系と14ブラベ格子	
第5週	ミラー指数と X線回折	様々な格子の結晶面とそのミラー指数および面間隔 ブラッグ条件とX線回折	
第6週	X線回折	結晶構造因子 (結果のみ) と消滅則、格子決定と結晶密度	
第7週	中間試験	定期試験の解答とベクトルの復習	
第8週	フーリエ解析と逆格子	電子密度の周期性と逆格子ベクトル	
第9週	ブラッグ条件 と結晶構造因子	結晶によるX線の散乱とブラッグ条件 X線回折法とフーリエ解析	
第10週	精密X線回折法	X線回折法の応用、各種回折法	
第11週	結晶固体	結晶の凝集エネルギーと格子エネルギー 金属のバンド構造	
第12週	結晶固体	ポーリングの法則 (配位数、多面体表記、半径比則)	
第13週	重要な結晶構造	MX型イオン結晶、MX ₂ 型イオン結晶 スピネル、ペロブスカイト、イルメナイト構造等	
第14週	格子欠陥 と機能性結晶材料	ショットキー欠陥とフレンケル欠陥、イオン伝導性 固体結晶の導電性 (導体と半導体)	
第15週	機能性結晶材料	固体電解質	
期末試験			

* 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)