

物質構造化学 (Chemical Structure of Materials)		4年・通年・2学修単位()・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：分光学の基礎について学習する。			
〔履修上の留意点〕 特別な予習は必要としないが、授業で行った演習問題は、もう一度自分の手を動かして計算して復習してください。			
〔到達目標〕 前期前半：量子論の概念が理解できる。 前期後半：化学結合と分子軌道が理解できる。 後期前半：分子の対称性が理解できる。 後期後半：分子の振動と回転が理解できる。			
〔評価方法〕 定期試験の平均(70%)と授業での取り組み(30%)で評価する。			
〔教科書〕 基礎量子化学 馬場正昭著 サイエンス社			
〔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	量子論の基本的な考え方	波と粒子	
第2週	量子論の基本的な考え方	演算子とシュレディンガー方程式	
第3週	量子論の基本的な考え方	一次元箱の中の粒子	
第4週	量子論の基本的な考え方	エネルギー準位と軌道	
第5週	量子論の基本的な考え方	調和振動子	
第6週	量子論の基本的な考え方	水素原子	
第7週	量子論の基本的な考え方	元素の周期性	
第8週	量子論の基本的な考え方	軌道角運動量とスピン・角運動量と原子スペクトル	
第9週	化学結合と分子軌道	ボルン オッペンハイマー近似	
第10週	化学結合と分子軌道	分子軌道法と永年方程式	
第11週	化学結合と分子軌道	水素分子	
第12週	化学結合と分子軌道	結合と結合	
第13週	化学結合と分子軌道	炭素原子の混成軌道	
第14週	化学結合と分子軌道	電子近似とヒュッケル法	
第15週	化学結合と分子軌道	結合の特異性	
前期期末試験			
第16週	分子の対称性	対称性と群論	
第17週	分子の対称性	既約表現	
第18週	分子の対称性	演習	
第19週	分子の対称性	対称性軌道	
第20週	分子の対称性	電子遷移の選択則	
第21週	分子の対称性	演習	
第22週	分子の振動と回転	並進、回転、振動	
第23週	分子の振動と回転	原子核の動きと対称性	
第24週	分子の振動と回転	二原子分子の回転準位	
第25週	分子の振動と回転	多原子分子の赤外スペクトル	
第26週	分子の振動と回転	多原子分子の回転	
第27週	分子の振動と回転	演習	
第28週	電子スピンと核スピン	E S R と N M R	
第29週	電子スピンと核スピン	スピンの結合によるスペクトルの分裂	
第30週	電子スピンと核スピン	演習	
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)