

科目	物理化学Ⅲ (Physical Chemistry III)		
担当教員	九鬼 導隆 教授		
対象学年等	応用化学科・5年・前期・必修・2単位【講義】(学修単位Ⅱ)		
学習・教育目標	A4-C3(100%)		
授業の概要と方針	4年生の物理化学Ⅱで学習した原子・分子構造論,分子間相互作用に引き続き,固体の電子構造論,固体の凝集力,固体表面等について講義し,一通りの固体物理化学入門を行う.次に,原子・分子構造や固体の電子構造の理解が前提となる,また,様々な分析技術の基礎となる分子分光光学を講義し,現代物理化学の基本を習得する.		
	到達目標	達成度	到達目標別の評価方法と基準
1	【A4-C3】固体のバンド理論が定性的に理解でき,導体,半導体,絶縁体とバンド構造の関係が理解できる.		前期中間試験とレポートで,導体,半導体,絶縁体とバンド構造の関係が的確に説明できるかどうかで評価する.
2	【A4-C3】固体の凝集力を,格子エンタルピーやマーデルング定数を通して理解する.また,固体表面への吸着現象を理解する.		前期中間試験とレポートで,ボルン-ハーバーサイクルと格子エンタルピー,マーデルング定数,固体表面の分析法や吸着等温式等が的確に説明できるかどうかで評価する.
3	【A4-C3】分子分光法に関する基礎的事項を理解する.		前期定期試験とレポートで,分子のエネルギー準位,ボアの振動数条件と光の輻射や吸収の関係等の分光法の基礎的事項を説明できるかどうかで評価する.
4	【A4-C3】代表的な分光法であるマイクロ波吸収(分子回転),赤外線吸収とラマン効果(分子振動),可視紫外吸収(電子状態)の原理や特徴を理解する.		前期定期試験とレポートで,それぞれの分光法の定性的な原理や分子定数等との関係等を適切に説明できるかどうかで評価する.
5	【A4-C3】分子の励起と緩和の動力学的基本過程を理解する.		前期定期試験とレポートで,光を吸収した分子がどのように励起されどう緩和してくるか等の過程が適切に説明できるかどうかで評価する.
6			
7			
8			
9			
10			
総合評価	成績は,試験90% レポート10% として評価する.中間・定期試験の単純平均を試験成績とする.合計100点満点で60点以上で合格とする.		
テキスト	「物理化学要論(第7版)」:P. W. Atkins・J. de Paula 著/千原秀明ら 訳(東京化学同人)		
参考書	「アトキンス物理化学 第10版 上・下巻」:P. W. Atkins・J. de Paula 著/中野元裕ら 訳(東京化学同人) 「量子力学入門ノート 第二版」:九鬼導隆 著(神戸高専生協) 「なっとくする量子化学」:中田宗隆 著(講談社) 「基礎コース物理化学Ⅱ 分子分光学」:中田宗隆 著(東京化学同人) 「分子の構造」:坪井正道 著(東京化学同人)		
関連科目	C1~C3の数学Ⅰ・Ⅱ・物理, C3 分析化学Ⅱ, C3 物理化学Ⅰ, C4 物理化学Ⅱ, C4 応用数学Ⅰ・Ⅱ, C4 応用物理Ⅰ・Ⅱ		
履修上の注意事項	1~3年までの数学Ⅰ・Ⅱと物理を良く理解しておくことが望ましい.また,3~4年の物理化学Ⅰ・Ⅱ,4年生の応用数学Ⅰ・Ⅱ,4年生の応用物理Ⅰ・Ⅱの内容をしっかりと理解しておくことが望ましい.		

授業計画 (物理化学Ⅲ)

	テーマ	内容(目標・準備など)
1	量子力学の分子への応用	固体の電子状態や分子分光学の基礎となる、量子力学の分子への応用(物理化学IIで学習)を復習する。分子のハミルトニアンとボルン-オープンハイマー近似、軌道近似、LCAO近似と分子軌道等について復習する。
2	固体の種類	固体の結合様式によって固体を分類する。
3	金属やイオン性固体のバンド構造	分子軌道法の概念を金属やイオン性固体の化学結合系に適用し、金属やイオン性固体ではバンド構造ができることを示し、バンドエネルギーやバンドギャップ、導体、半導体、絶縁体をバンド構造から解説する。
4	バンド構造	アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属、半導体、絶縁体で、原子軌道からどのように各バンドが形成されるかを解説する。
5	格子エンタルピー	固体の凝集力として格子エンタルピーを示し、ボルン-ハーバーサイクルより格子エンタルピーを解説する。
6	イオン性結晶とマーデルング定数	イオン性結晶の凝縮力はクーロン相互作用が主であることを示し、結晶格子にあるそれぞれのイオンのクーロン相互作用の和が、結晶格子の構造で決まるマーデルング定数で簡潔に表されることを解説する。
7	固体表面の状態とその分析方法	固体の表面の状態を説明し、近年脚光を浴びている固体表面の分析法(ESCAやオージェ分光等)を解説する。
8	中間試験	1週目から7週目までの内容で中間試験を行う。
9	分子分光学の概要、中間試験の解答・解説	分子と光の相互作用とそこから得られるスペクトルが種々の分析法の基礎となっていることを示しながら、分子分光学の原理や役割を概観する。また、中間試験の解説も行う。
10	分子のエネルギー状態と電磁波の輻射・吸収	並進運動を分離したあとの分子のエネルギー状態(分子回転、分子振動、電子状態)、電磁波の輻射・吸収とボーアの振動数条件等の分子分光学の基本概念を解説する。
11	マイクロ波吸収(分子回転)	回転運動と慣性モーメントを説明し、分子の回転運動を記述する。分子がマイクロ波を吸収する原理を簡単に説明し、分子の回転運動の量子数とマイクロ波吸収スペクトルとの関係を簡単に解説する。
12	分子振動と基準振動	連成系の振動を説明し、基準振動や基準座標を解説する。
13	赤外線吸収とラマン効果	分子が赤外線を吸収したりとラマン散乱を起こしたりする原理を簡単に解説し、いわゆる振動分光学(IR吸収スペクトルとラマンスペクトル)と分子振動の関係やそこからわかる分子定数等を解説する。
14	電子状態の励起と緩和の動力学	フランク-コンドンの原理(垂直遷移)、蛍光や燐光等の輻射遷移と内部転換や項間交叉等の無輻射遷移等を説明して、分子の励起と緩和の過程を解説する。
15	可視紫外吸収(電子状態)	電子状態の励起と緩和の動力学を基に、可視紫外吸収や蛍光・燐光スペクトルと分子の電子状態の関係を解説する。
16		
17		
18		
19		
20		
21		
22		
23		
24		
25		
26		
27		
28		
29		
30		
備考	前期中間試験および前期定期試験を実施する。 本科目の修得には、30時間の授業の受講と60時間の事前・事後の自己学習が必要である。事前に教科書の該当箇所を読んで、わかる部分とわからない部分をはっきりさせておく。事後には教科書と授業ノートで復習し、また、教科書の例題や章末問題、こちらが配布する演習問題を解く。	