

科目		物理化学II (Physical Chemistry II)		
担当教員		(前期)九鬼 導隆 教授, (後期)渡辺 昭敬 教授		
対象学年等		応用化学科・5年・通年・必修・2単位 (学修単位III)		
学習・教育目標		A4-C3(100%)	JABEE基準1(1) (d)1.(d)2-a,(d)2-d,(g)	
授業の概要と方針		4年生の物理化学で学習した原子構造論に引き続き, 分子構造論を講義し, 一通りの量子化学入門を行う。次に, 固体や液体などの凝縮系の物理化学, 分子分光学を講義し, 現代物理化学の基礎を習得する。		
		到達目標	達成度	到達目標毎の評価方法と基準
1	【A4-C3】変分法の原理, 分子の形成や分子軌道についての基本的な概念を理解する。			前期中間試験とレポートで, 変分原理, 分子を扱う際の種々の近似, 分子軌道について説明させ, 的確に説明できるかどうかで評価する。
2	【A4-C3】等核2原子分子の分子軌道についてエネルギーダイアグラムが描け, 電子構造より結合次数が計算できる。			前期中間試験とレポートで, 2原子分子のエネルギーダイアグラムを描き, 結合次数等が計算できるかどうかで評価する。
3	【A4-C3】ヒュッケル法等の分子軌道法の仕組みを理解する。			前期定期試験とレポートで, ヒュッケル法等の分子軌道法について, 近似の扱い等が的確に説明できるかどうかで評価する。
4	【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。			前期定期試験とレポートで, 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。
5	【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。			前期定期試験とレポートで, ボルン-ハーバーサイクルと格子エンタルピー, マーデルング定数等が的確に説明できるかどうかで評価する。
6	【A4-C3】分子分光法に関する基礎的事項を理解する。			後期中間試験とレポートで, ボアの振動数条件と発光, 吸収の関係等の分光学の基礎的事項を説明できるかどうかで評価する。
7	【A4-C3】スペクトルの基本原理を理解し, スペクトルから分子定数を導出できる。			後期中間および後期定期試験とレポートで, 実際のスペクトルデータを用いて分子定数を求めることができるかどうかで評価する。
8	【A4-C3】電気双極子や, 電気双極子の相互作用の観点から, 分子性物質の凝集力を理解する。			後期定期試験とレポートで, 電気双極子間の相互作用や, 分子性物質の全相互作用についての的確に説明できるかどうかで評価する。
9				
10				
総合評価		成績は, 試験90% レポート10%として評価する。「評価方法と基準」にある, 1~2を前期中間試験で, 3~5を前期定期試験で, 6~7を後期中間試験で, 7~8を後期定期試験で評価し, 4回の試験の平均点を試験成績とする。レポートの成績と合わせて評価し, 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5版)」: P.W.Atkins著, 千原秀明・稲葉章 訳 (東京化学同人) 「量子物理化学入門」: 寺坂利孝・森聖治 (三共出版)		
参考書		「初等量子化学 第2版」: 大岩正芳 (東京化学同人) 「アトキンス物理化学 (上・下)」: P.W.Atkins著, 千原秀昭 他 訳 (東京化学同人) 「Molecular Spectrum and Molecular Structure」: G. Herzberg (KLIKER) 「なっとくする量子化学」: 中田宗隆 (講談社)		
関連科目		1~3年の数学・物理, 3~4年の応用物理I・II, 4年生の応用数学I・II・物理化学I		
履修上の注意事項		1~3年までの数学・物理を良く理解しておくことが望ましい。また, 3~4年の応用物理I・II, 4年生の応用数学I・II・物理化学I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 1 (物理化学II)		
回	テーマ	内容(目標, 準備など)
1	分子の電子状態: 核の運動の分離, 軌道近似	多核・多電子系のハミルトニアンから, ボルン-オッペンハイマー近似を用いて核の運動を分離し, 多電子系のハミルトニアンへと移行できることを示す。さらに, 多電子系のハミルトニアンが, 電子-電子の相互作用のため, 変数分離できないことを示し, 軌道近似を用いることを解説する。
2	原子価結合法と分子軌道法	分子の中の電子の状態を記述する方法として, 原子価結合法と分子軌道法の特徴や限界について解説する。
3	分子軌道法: 水素分子イオンの形成	近似問題の基本となる変分法について解説してからLCAO近似を導入し, 分子軌道法を用いて, 一番簡単な系である水素分子イオンが形成し, 分子軌道が結合性軌道と反結合性軌道に分離することを解説する。
4	等核二原子分子	分子軌道法を用いて, 等核二原子分子の電子構造について解説し, 等核二原子分子の分子軌道の様子と電子構造から, 幾つかの化学的性質が説明できることを示す。
5	異核二原子分子	等核二原子分子に続き, 異核二原子分子の電子構造, イオン性と共有性について簡単に解説する。
6	多原子分子のエネルギー	多原子分子の中の電子のエネルギーがどう表されるか計算する。
7	ヒュッケル法	電子-電子の相互作用を一電子ポテンシャルと近似するヒュッケル法について解説する。一電子ハミルトニアンを用いた場合の分子のエネルギーやその軌道エネルギーとの関係を示し, さらに, 重なり積分や隣接原子以外で共鳴積分を無視して, LCAO係数を求め, 分子のエネルギー状態等について講義する。
8	中間試験	中間試験
9	共役系の電子状態: ブタジエン	ヒュッケル法をもとにブタジエンの電子状態, 物性等を解説する。
10	共役系の電子状態: ベンゼン	ヒュッケル法をもとにベンゼンの電子状態, 物性等を解説する。
11	種々の近似法	ハートリー-フォック方程式とPPP, CNDO, MINDO等の近似法やab initio計算を簡単に説明するとともに, ハートリー-フォック近似の限界を超えるべく開発された, MP展開やCI法について簡単に解説する。
12	金属とイオン性固体・バンド構造	分子軌道法の概念を固体の化学結合系に適応し, 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。
13	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。
14	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。
15	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。
16	分子分光法: 序論	分子分光法が, 光と分子の相互作用を通して分子構造や化学反応を理解する学問であることを紹介する。更に, 光が粒子と波の二重性を持つことを復習して分子分光法理解への素地を固める。
17	分子分光法: 原理	振動電場と荷電粒子による単純モデルを用いて光と分子の相互作用を理解する。また, ボーアの振動数条件, 吸収・発光などの分子分光法における基本原理について学習する。
18	分子分光法: 方法論	吸収・発光スペクトルの測定原理と実験手法について学習する。また, 吸収スペクトルの強度がランベルト-ベールの法則に基づいて評価されることを理解する。
19	回転スペクトルの原理	分子の回転エネルギーは量子化されていることを学習する。更に, 慣性モーメントが分子構造に応じて定式化されていることを学習し, これを用いて回転エネルギーが記述されることを理解する。
20	回転スペクトルの解析	回転遷移の選択則を学習し, 実測の回転スペクトルから回転定数を導出する方法を理解する。更に, 回転定数から原子間距離や角度の分子構造パラメータを求める方法を学習する。
21	二原子分子の振動スペクトル	二原子分子における調和振動子を用いて, 振動エネルギーが分子の換算質量と力の定数で記述され, 量子化されていることを学習する。また, 振動と回転は同時に励起され, そのスペクトルはP, Q, R分枝で形成されることを理解する。
22	多原子分子の振動スペクトル	運動の自由度について学習し, 多原子分子における基準振動モードを理解する。また, 赤外遷移の選択律が基準振動に伴う双極子モーメント変化に関連付けられることを学習する。更に, 官能基の特性振動から分子構造を予測できることを理解する。
23	中間試験	16~22回講義分の中間試験
24	中間試験解答	中間試験の解答を黒板を用いて説明し, 注意点を指摘する。
25	紫外可視スペクトル	紫外可視領域で起こる電子遷移を学習する。分子の電子励起は振動励起も同時に伴うことを, フランク-コンドン原理に基づいて理解する。また, 電子遷移には関与する分子軌道に応じて様々なタイプが存在することも学習する。
26	放射減衰と無放射減衰	光吸収による電子励起された分子のエネルギー失活過程を学習する。ジャブロンスキーの図を用いて, 蛍光やりん光の放射過程と内部変換や振動緩和などの無放射過程が存在することを理解する。
27	光化学	励起状態の失活過程を定量的に取り扱う方法を学習する。量子収量を反応速度論的に表す方法を理解し, 蛍光放出速度との関連付けを行う。更に, ステルン-フォルマーの式を用いて消光過程を理解する。
28	ファンデルワールス相互作用	電気双極子の定式化を行い, 永久或いは誘起双極子の間でもたらされる相互作用を学習する。更に, 永久電気双極子を持たない無極性分子も分散相互作用で凝集出来ることを理解する。
29	全相互作用	電気双極子の相互作用が距離の6乗に反比例すること, 分子同士が近接した時に反発的な相互作用が生ずることを, レナード-ジョーンズポテンシャルを用いて理解する。また, 最も強い分子間相互作用の例として水素結合について学習する。
30	演習	16~29回講義分の中で, 重要と思われる項目について演習問題に取り組み, 解説を加える。
備考	本科目の修得には, 60 時間の授業の受講と 30 時間の自己学習が必要である。前期, 後期ともに中間試験および定期試験を実施する。	