

(科目コード : 8907820007AE)

【改訂】第27版(2013-03-21)

【科目】物理化学特論

【科目分類】専門科目

【選択・必修の別】選択

【学期・単位数】前期・2単位

【対象学科・専攻】環境 2年

【担当教員】辻 和秀

【授業目標】

量子化学、特に分子軌道の基礎と、分光学的性質とどう結びつか理解できる。  
群論および分子の形から分子軌道、分子振動を予想できる。

【教育方針・授業概要】

本科目の総授業時間数22.5時間である。  
量子化学の基礎(変分法、摂動法、角運動量)  
群論(群、点群、規約表現)  
光吸収と摂動法、振動分光法への群論の応用  
分子軌道法への群論の応用

【教科書・教材・参考書等】

参考書:物理化学(上):マッカーリ・サイモン:東京化学同人  
参考書:基礎量子化学:小尾欣一、渋谷一彦:化学同人  
参考書:分子の対称と群論:中崎昌雄:東京化学同人  
参考書:基礎物理化学:アトキンス:東京化学同人

【成績評価方法】

[前期]期末試験:80%,レポート:20%

【達成目標】

	達成目標	割合	評価方法
1	群論、点群の化学への応用に関する基本的な概念を理解している。	50 %	
2	振動分光法や分子軌道法に群論を応用し、基本的な問題が解ける。	50 %	

【本校の学習・教育目標】

(C) 技術的問題解決のための専門分野の知識を身に付ける  
各専攻分野における専門科目を総合的に学習することにより、技術的課題が解決できる

【授業計画】(物理化学特論)

回数	授業の主題	内容	レポート	宿題
1-3	量子化学	シュレディンガー方程式 波動関数の性質 B-O近似 分子の振動と回転 摂動法と変分法		
4-6	分子軌道法入門	ヒュッケル近似と分子軌道の仕組み 2原子分子や3原子分子の分子軌道 Walsh Diagram		
7-9	群論入門	対称操作 対称操作の表現 表現の可約表現、規約表現 指標と指標表 可約表現、規約表現と簡約		
10-13	群論の分光学への応用	Einsteinの遷移確率の考え方 光の吸収はなぜ起こるか 基準振動と選択則 ラマン効果とその選択則		
14	群論の分子軌道法への応用	分子軌道法への群論の応用		