

(科目コード : 8907820007AE)

【改訂】第3版 (2019-03-25)

【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】

量子化学の基本的な系へ摂動法や変分法を適用できる
点群について理解でき、規約表現の公式が使える
群論を単純な分子の振動分光へ応用できる
群論を単純な分子の分子軌道法へ応用できる

【教育方針・授業概要】

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：現代物理化学 : 寺嶋正秀・馬場正昭・松本吉泰 : 化学同人

【事前に行う準備学習】

授業内容の背景にある、量子化学の内容をしっかりと復習して望んでください。課題も多めですが、しっかりと取り組んでください。

【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 %	試験及び宿題で評価する
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 %	試験および宿題で評価する

【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-0近似 分子の振動と回転の 摂動法と変分法		角運動量や摂動法に関する宿題を課す
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		分子軌道法に関する宿題を課す
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		分子の分類や可約表現の簡約に関する宿題を課す
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		分子の振動に関する宿題を課す
14-15	群論の分子軌道法への応用	分子軌道法への群論の応用		分子軌道の対称性に関する宿題を課す