

科目コード/科目名 (Course Code / Course Title)	CC179/物理化学3 (Physical Chemistry 3)		
担当者名 (Instructor)	永野 修作(NAGANO SHUSAKU)		
学期 (Semester)	秋学期(Fall Semester)	単位 (Credit)	2単位(2 Credits)
科目ナンバリング (Course Number)	CHE2210	言語 (Language)	日本語 (Japanese)
備考 (Notes)			

授業の目標 (Course Objectives)

量子的な分子軌道の基礎概念および取り扱い(近似的手法)を学び、物理化学的な意味を理解する。分子構造や分子の電子状態を理解し、分光学、核磁気共鳴の基礎を習得する。

In this class, students study the basic concept of the molecular orbital method and understand the molecular structure and electronic state of molecules. Moreover, students also study basic spectroscopy, magnetic resonance, and X-ray scattering on how to evaluate molecular structure based on quantum chemistry and structural chemistry.

授業の内容 (Course Contents)

分子構造を量子論的に理解することは現代化学において必須である。分子軌道法の基礎概念および物理的な意味を習得し、分子構造や分子の電子状態を理解する。また、光と分子の相互作用から分子構造や電子構造を解析する分光学について学び、振動回転スペクトル、電子スペクトルを理解する。さらに、磁気共鳴や X 線散乱の基礎を習得し、化学に用いられる構造解析法の原理を理解する。

To understand the molecular structure from quantum theory is necessary for structural analysis and studies on optical and electronic molecular properties. In this lecture, students study the basic concept and physical meaning of the molecular orbital method and understand the molecular structure and molecular electronic state. Students also study on spectroscopy, which analyzes molecular and electronic structures from the interaction between light and molecules. Students understand vibrational and rotational spectra and electronic spectra. Besides, students learn the basics of magnetic resonance and X-ray scattering for the structural analysis methods in chemistry.

授業計画 (Course Schedule)

1. 量子化学の復習
2. 近似的手法(変分法と摂動法)
3. 化学結合(水素分子)
4. 化学結合(二原子分子)
5. 混成オービタル
6. π 電子系の取り扱い(ヒュッケル近似)
7. 演習問題
8. 分子分光学の基礎
9. 分子の回転
10. 二原子分子の振動
11. 多原子分子の振動
12. 赤外吸収スペクトルとラマン散乱スペクトル
13. 電子遷移と電子スペクトル
14. 核磁気共鳴

授業時間外(予習・復習等)の学習 (Study Required Outside of Class)

物理化学 2 を復習しておくこと。

成績評価方法・基準 (Evaluation)

筆記試験(Written Exam)(80%)/リアクションペーパー課題(20%)

テキスト(Textbooks)

1. P. W. Atkins and J. de Paula, 2017, 『アトキンス 物理化学(上) 第 10 版』、東京化学同人 (ISBN:9784807909087)
2. P. W. Atkins and J. de Paula, 2017, 『アトキンス 物理化学(下) 第 10 版』、東京化学同人 (ISBN:9784807909094)

参考文献 (Readings)

1. マッカーリ サイモン、2013、『物理化学(上)分子論的アプローチ』、東京化学同人

その他(HP等)(Others(e.g.HP))

注意事項(Notice)