

科 目	分子分光学 (Molecular Spectroscopy)			
担当教員	九鬼 導隆			
対象学年等	応用化学専攻・1年・後期・選択・2単位			
学習・教育目標	工学複合プログラム	A4-3(100%)	JABEE基準1(1)	(d)1,(d)2-a,(d)2-d,(g)
授業の概要と方針	驚異的な分析能力を発揮する機器分析の多くは、基本原理として分子分光学を用いている。本講義では、分子の中の核や電子の運動とエネルギー状態および励起と緩和の動力学を中心に据え、分子分光学の基礎理論を解説する。			
	到達目標	達成度	到達目標毎の評価方法と基準	
1	【A4-3】分子の電子・振動・回転状態のエネルギー準位とそれらの関係を理解し、分子の励起・緩和過程やその機構を定性的に説明できる。			中間試験で、分子の励起と緩和の動力学をポテンシャル曲面上の代表点の運動としての的確に説明できるかどうかで評価する。
2	【A4-3】可視紫外吸収、発光（蛍光・燐光）スペクトルの原理と得られる情報について説明できる。			中間試験で、可視紫外吸収、発光（蛍光・燐光）の選択律、フランク-コンドン原理、分子の中の電子のエネルギー状態と電子遷移に伴う分子構造の変化等が的確に説明できるかどうかで評価する。
3	【A4-3】多体系の振動問題が、固有値問題・主軸変換問題であることを理解し、GF行列法による基準振動解析の基本を説明できる。			中間試験で、強制振動や簡単な系の連性振動を解くことができ、また、GF行列法の基本原理を的確に説明できるかどうかで評価する。
4	【A4-3】振動分光（赤外吸収とラマン分光）の原理と得られる情報について説明できる。			中間試験で、赤外線吸収・ラマン分光の基本理論、分子振動と分子構造の関係についての的確に説明できるかどうかで評価する。
5	【A4-3】基本的な系について、回転運動に関する慣性モーメントや角運動エネルギーを計算できる。			定期試験で、基本的な系の慣性モーメントや角運動量、角運動エネルギーが計算できるかどうかで評価する。
6	【A4-3】マイクロ波分光の原理と得られる情報について説明できる。			定期試験で、分子の構造や対称性と慣性モーメント、対称性から見た分子の回転エネルギーの分類等が的確に説明できるかどうかで評価する。
7	【A4-3】核スピンのエネルギー状態や核磁気共鳴の基本理論を説明できる。			定期試験で、核磁気の大さや、外部磁場による核スピンのエネルギー分裂、分裂エネルギーのラーモア周波数表現等が的確に説明できるかどうかで評価する。
8	【A4-3】局所磁場や局所的遮蔽、化学シフトを理解し、環境によって化学シフトが変化すること、また、スピン結合によって吸収線が分裂することを説明できる。			定期試験で、局所的遮蔽による局所磁場の変化と化学シフトへの影響、局所的遮蔽の原因、スピン結合と吸収線の分裂パターン等に関する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100%として評価する。中間試験、定期試験をそれぞれ50%とし、2回の定期試験の合計で100%として評価する。ただし、場合によっては臨時に追加の試験を行い、臨時の試験を含めた平均とする場合がある。			
テキスト	「分子の構造」：坪井正道（東京化学同人）			
参考書	「アトキンス物理化学 第6版 下巻」：P.W. Atkins 著 / 千原秀明・中村亘男 訳（東京化学同人） 「分子の構造をきめる」：G. M. Barrow著 / 島田章 訳（東京化学同人）			
関連科目	本科4年の物理化学、5年の応用物理、専攻科1年前期の量子物理			
履修上の注意事項	量子力学の知識を前提とするので、本科4年生の物理化学や5年生の応用物理をしっかりと理解しておくことが望ましい。また、専攻科1年前期の量子物理を履修しておくことが望ましい。さらに、振動現象や回転運動も取り扱うので、本科4年生の応用物理もしっかりと理解しておくことが望ましい。			

