

科目名(和)			科目名(英)			
光ナノサイエンスコアⅣ (量子化学・熱力学)			Opto-Nano Science Core IV (Quantum Chemistry, Thermodynamics)			
科目区分	単位数	選択・必修	授業形態	授業番号	開講時期	講義室
基礎科目	1	必修	講義	321306	4月～5月	大講義室

1. 科目の概要

<p>【担当教員】 柳 久雄、柳田 健之、田原 圭志朗、安原 主馬</p> <p>【教育目的／授業目標】 分子科学分野における光ナノサイエンスの基盤となる量子化学と熱力学の基礎知識のプラットフォームの構築をはかる。</p> <p>【指導方針】 講義形式で行う。授業中に試験またはレポートを課すことにより、理解を深める。</p>

2. 授業計画等

	【テーマ】	【内容】
1回	励起状態からの緩和	Franck-Condon原理、振動緩和と無放射遷移、スピン軌道相互作用、一重項状態と三重項状態、蛍光と燐光
2回	分子の対称性(群論)	分子の対称性、対称要素と点群、指標の表、可約表現と既約表現
3回	群論による分子軌道の解法(1)	分子軌道の既約表現、永年方程式の簡略化
4回	群論による分子軌道の解法(2)	基底状態と励起状態の対称性、電子遷移則の判定
5回	分子の振動	調和振動子、振動エネルギーの量子化、ボルツマン分布、赤外光による振動遷移
6回	熱力学(1)	熱力学の基礎、熱力学で扱う諸量の導入
7回	熱力学(2)	熱力学第一法則、エンタルピー、エントロピー、
8回	熱力学(3)	熱力学第二法則、自由エネルギー、クラウジウスの式、マクスウェルの関係式

【テキスト】
・プリント等を適宜配布する。

【参考書】
・井上晴夫著「量子化学Ⅰ」 丸善
・馬場正昭著「基礎量子化学Ⅰ－量子論から分子を見る－」 サイエンス社
・清水明著「熱力学の基礎」 東京大学出版会

<p>【履修条件】 特になし。</p> <p>【オフィスアワー】 特に設定はしない。時間の許す限り対応する。</p> <p>【成績評価の方法と基準】 評価は、試験等によって行う。また、分子科学分野における光ナノサイエンスの幅広い知識の習得を基準とする。</p> <p>【関連科目】 「光ナノサイエンスコアⅢ」(基礎科目)</p> <p>【注意事項】 特になし。</p>
