

## 2025 年度シラバス

科目分類/Subject Categories			
学部等/Faculty	/工 芸 学 部 : /School of Science and Technology	今年度開講/Availability	/有 : /Available
学域等/Field	/物質・材料科学域 : /Academic Field of Materials Science	年次/Year	/2 年次 : /2nd Year
課程等/Program	/専門基礎科目 : /Specialized Foundational Subjects	学期/Semester	/前学期 : /First term
分類/Category	/化学 : /Chemistry	曜日時限/Day & Period	/月 4 : /Mon.4

科目情報/Course Information				
時間割番号 /Timetable Number	15011401			
科目番号 /Course Number	15061051			
単位数/Credits	2			
授業形態 /Course Type	講義 : Lecture			
クラス/Class	ma			
授業科目名 /Course Title	物理化学Ⅱ : Physical Chemistry II			
担当教員名 / Instructor(s)	/金折 賢二 : KANAORI Kenji			
その他/Other	インターンシップ実施科目 Internship	国際科学技術コース提供科目 IGP	PBL 実施科目 Project Based Learning	DX 活用科目 ICT Usage in Learning
				○
	実務経験のある教員による科目 Practical Teacher			
科目ナンバリング /Numbering Code	B_PS2330			

授業の目的・概要 Objectives and Outline of the Course	
日	化学Ⅰにおいて学んだ、化学結合論を深く理解し、3 年次以降の専門科目の基礎学力を養うのが目的である。すべてのトピックは、化学Ⅰの確認から導入するが、広い範囲を半年間で網羅することになるので、予習復習なしで理解することは難しい。その回の授業については宿題を解いてしっかり予習復習してほしい。適宜プリントを配布して内容を補う。
英	The purposes of Physical Chemistry I are to understand deeply the chemical bond theory which was studied in the Fundamental Chemistry I, and to support the basic scholarship of the special subjects after the 3rd grades. Although they are certainly introduced from the check of the Fundamental Chemistry I, since all the topics will cover the wide range within half a year, it is difficult to understand the contents without the preparation and review of each lecture. The students must solve examples and exercise problems, and prepare/review firmly about the lesson. Although it is the lesson based on the designated textbook, some prints will be distributed suitably. Self-Learning is absolutely required.

学習の到達目標 Learning Objectives	
日	<p>量子力学に関係する古典力学の法則について理解する。</p> <p>量子力学の諸原理を学習して、その背景を理解する。</p> <p>シュレディンガー方程式、波動関数および期待値についての理解を深める。</p> <p>1 次元の箱の中の粒子のエネルギー準位と波動関数の性質を学び、トンネル効果についての理解する。</p> <p>1 次元の箱の中の粒子の調和振動についてのエネルギー準位と波動関数の性質を理解する。</p> <p>1 次元の考え方を 2 次元および 3 次元に拡張し、粒子の自由な運動について学習し、原子軌道の角度依存性を理解する。</p> <p>水素原子の原子軌道とエネルギー準位を整理し、水素原子の輝線スペクトルについて説明できる。</p> <p>水素原子の電子軌道の形状とエネルギーを理解して、軌道とスピンの関係について習得する。</p> <p>角運動量の量子化表現を習得して、方位量子数、磁気量子数との関連を理解する。</p>

	<p>多電子原子の構成原理を理解して、電子配置を説明できる。</p> <p>水素分子イオンの分子軌道法を用いて解き、結合性軌道および反結合生成軌道の波動関数とエネルギー準位について習得する。</p> <p>共有結合について電子状態から説明できる。</p> <p>等核二原子分子および異核二原子分子について分子軌道法を用いて電子状態が説明できる。</p> <p>混成軌道と原子価殻電子反発測について習得する。</p> <p>ヒュッケル近似により <math>\pi</math> 電子をもつ化合物の波動関数、電子密度、エネルギー準位について説明できる。</p> <p>分子の回転、振動および電子遷移のエネルギー準位を整理し、理解する。</p>
英	<p>To learn the laws of classical mechanics related to quantum mechanics.</p> <p>To learn the principles of quantum mechanics and understand the background.</p> <p>To learn the Schrödinger equation, wave function and expected value.</p> <p>To learn the energy levels of particles in a one - dimensional box and the nature of the wave function and understand the tunnel effect.</p> <p>To learn the energy level and the nature of the wave function for harmonic oscillations of particles in one - dimensional boxes.</p> <p>To learn how to extend the one-dimensional idea to two and three dimensions, and to understand the free movement of particles and the angular dependence of atomic orbitals.</p> <p>To learn the atomic orbitals and energy levels of hydrogen atom and explain the spectrum of hydrogen atom.</p> <p>To learn the shape and energy of the electron orbit of the hydrogen atom, and learn about the relation between the orbital and the spin.</p> <p>To learn the quantization of angular momentum and understand the relation with azimuth quantum number and magnetic quantum number.</p> <p>To learn the Aufbau principle of multiple electron atoms, and the electron arrangement.</p> <p>To solve hydrogen molecular ion by using molecular orbital method and learn wave function and energy level of bonding and antibonding orbitals.</p> <p>To explain electronic states by using molecular orbital methods for homonuclear diatomic molecules and heteronuclear diatomic molecules.</p> <p>To learn hybrid orbitals and valence bond shell electron repulsion rule.</p> <p>To explain the wave function, electron density and energy level of compounds with <math>\pi</math> electrons by Hückel approximation.</p> <p>To learn energy levels of molecular rotation, vibration and electronic transitions.</p>

## 学習目標の達成度の評価基準 / Fulfillment of Course Goals (JABEE 関連科目のみ)

日	
英	

授業計画項目 Course Plan			
No.		項目 Topics	内容 Content
1	日	量子論誕生の背景と前期量子論	量子論に関係する古典力学・電磁気学について、運動方程式、古典力学の波動方程式、クーロンの法則、電気双極子モーメントと磁気モーメントを解説し、量子論誕生の背景として、光の波動説、水素原子の輝線スペクトルにおける規則性の発見、電子の発見、ゼーマン効果、黒体放射スペクトルを解説する。 量子論の夜明けであるプランクの量子仮説とアインシュタインの光量子仮説を説明して、ボーアの原子モデルへのつながりを解説する。
	英	Background of quantum theory and old quantum theory	On classical mechanics and electromagnetism related to quantum theory, we describe the equation of motion, the wave equation of classical mechanics, Coulomb's law, electric dipole moment and magnetic moment. As the background of the birth of quantum theory
2	日	量子力学の確立	コンプトン効果、ド・ブロイの物質波の流れを概観して波動と粒子の二重性を説明し、その後の電子スピンの発見とパウリの排他原理の意義を解説する。 ハイゼンベルグの行列力学とシュレーディンガーの波動力学の誕生の経緯および波動関数の確率解釈、不確定性原理、ディラック方程式までの流れを説明して、次週以降のシュレーディンガー方程式の解法につなげる。
	英	Establishment of quantum mechanics	Compton effect and de Broglie's material wave flow are overviewed to explain the duality of wave and particle, and the discovery of electron spin and Pauli's exclusion principle are explained. Heisenberg's matrix mechanics and the process of

			Schrödinger's
3	日	シュレーディンガー方程式と波動関数	シュレーディンガー方程式の構成および波動関数の要件を変数分離法、規格化、エルミート演算子と波動関数の直交によって説明し、シュレーディンガー方程式に用いられる近似として以下の事柄について説明する。 ポテンシャルエネルギーと波動関数の基本形状、波動関数の基底関数による線形近似、ボルン-オッペンハイマー近似、一電子近似、摂動法と変分法
	英	Schrodinger equation and wave function	The composition of Schrödinger equation and requirements of wave function are explained by variable separation method, such as normalization, orthogonality of Hermitian operator and wave function. The following matters will be explained as approximations
4	日	自由粒子の1次元の運動	1次元の自由粒子の運動、有限の矩形ポテンシャルにおける粒子の運動（トンネル効果）、1次元井戸型ポテンシャル内の粒子の運動について詳説する。
	英	One-dimensional motion of free particle	The one-dimensional movement of free particle, the movement of particles at a finite rectangular potential (tunneling effect), and the movement of particles within one-dimensional well-type potential are described in detail.
5	日	中心ポテンシャルによる粒子の運動：1次元振動運動	1次元調和振動子型ポテンシャルにおける粒子の運動を詳説し、振動量子数を導入する。
	英	Particle motion due to center force potential: one-dimensional vibrational motion	Particle motion due to center force potential: one-dimensional vibrational motion
6	日	2次元、3次元における粒子の運動	粒子の1次元シュレーディンガー方程式の結果を変数分離法によって2次元および3次元の箱中の粒子へと拡張する。 シュレーディンガー方程式の極座標表示を学び、そこから現れてくる球面調和関数と動径波動関数の関係を式の変形をとおして学ぶ。球面上に束縛された粒子がとりうる波動関数である球面調和関数の導出と基本形状について説明し、極座標表示されたシュレーディンガー方程式の一般的な解法を説明する。
	英	Particle motions in two- and three- dimensional space	The results of one dimensional Schrödinger equation of particle are extended to particle in two and three dimensional boxes by variable separation method. Learn the polar coordinate representation of the Schrödinger equation and learn the relationship be
7	日	水素類似原子の電子軌道	水素類似原子のシュレーディンガー方程式から水素類似原子の動径波動関数と動径分布関数の性質を学び、水素型原子の構造とエネルギーの関係を学ぶ。 変数分離によって動径波動関数を導出し、s,p,d,f オービタルの形状とエネルギー準位を学ぶ。動径分布関数の形状から電子密度の概念を取得する。
	英	Electron state of hydrogen-like atom	From the Schrödinger equation of hydrogen-like atom, we learn the dynamic radial wave function and the nature of radial distribution function of hydrogen-like atoms and learn the relation between hydrogen type atom structure and energy. Radial wave functi
8	日	水素類似原子までの振り返り（中間試験）	量子力学の成立過程においての重要な事柄を整理し、様々なポテンシャルにおける粒子の運動について振り返る。トンネル効果や、1次元井戸型ポテンシャル内の粒子の波動関数とエネルギーについて説明した後、球面調和関数と動径波動関数から水素類似原子の波動関数が構成されていることを定着させる。
	英	Overview of hydrogen-like atom (Midterm exam)	We will organize important matters in the formation process of quantum mechanics and look back on particle motion in various potentials. After explaining the tunnel effect and the wave function and energy of the particles in the one-dimensional well type
9	日	角運動量とスピン	角運動量の量子化と角運動量の演算子、角運動量の極座標表示と空間量子化を説明する。 回転、角運動量について説明し、円運動する粒子の波動関数について説明した上で、角運動量の量子化について説明した後、球面上を自由に動く粒子について拡張し、方位量子数、磁気量子数と角運動量の関係について述べる。さらに、角運動量と磁気的性質に

			ついて、角運動量と磁気モーメント、角運動量の合成と水素原子の輝線スペクトルの微細構造の解析を説明する。
	英	Angular momentum and spin	Explain quantization of angular momentum and operator of angular momentum, polar coordinate of angular momentum and spatial quantization. Rotational motion and angular momentum will be described, and the wave function of the particle moving in a circle w
10	日	多電子原子の電子軌道	周期律の発見、電子殻と周期表について復習した後、多電子原子の軌道エネルギー計算方法（ヘリウム原子のエネルギー近似計算、ハートリー-フォック近似、スレーター行列式、有効核電荷とスレーター則）について説明する。多電子原子の電子状態を理解するために、軌道角運動量とスピン角運動量の合成から全角運動量子数を求め、多電子原子の項について説明する。パウリの原理、フント則を使用して構成原理を説明し、多電子原子の電子配置と基底状態の項の求め方を説明する。多電子原子の電子配置とイオン化エネルギーと電子親和力の関連を説明する
	英	Electron orbitals of multiple electron atoms	After reviewing periodic rule, electronic shell and periodic table, the orbital energy calculation method of multi-electron atoms (energy approximate calculation of helium atom, Hartree-Fock approximation, Slater matrix formula, effective nuclear charge a
11	日	共有結合と水素分子イオン	共有結合とオクテット則、水素分子イオン H <sub>2</sub> <sup>+</sup> の構造、 $\sigma$ 結合と $\pi$ 軌道について説明する。 原子価結合法と分子軌道法の違いを学び、水素分子イオン H <sub>2</sub> <sup>+</sup> の分子軌道法による近似解を求めて、共有結合の本質を説明する。
	英	Covalent bond and hydrogen molecule ion	Covalent bond and octet rule, structure of hydrogen molecular ion, H <sub>2</sub> <sup>+</sup> , $\sigma$ bond and $\pi$ orbit will be explained. Learn the difference between the valence bond method and the molecular orbital method and explain the essence of covalent bond by finding an app
12	日	等核および異核二原子分子	水素分子 H <sub>2</sub> の構造から、第 2 周期の等核二原子分子の電子構造を分子軌道法への電子の充填によって説明する。 異核二原子分子の電子構造について説明して、電気陰性度との関連にふれる。
	英	homo- and heteronuclear diatomic molecules	From the structure of the hydrogen molecule H <sub>2</sub> , we explain the electronic structure of the homonuclear diatomic molecule of the second period by electron filling to the molecular orbital method. The electronic structure of heteronuclear diatomic molecules
13	日	分子構造化学 (1) : 混成軌道と原子価殻電子対反発則	量子化学の有機化学への応用について、混成軌道と原子価殻電子対反発則 (VSEPR 則) を解説する。
	英	Molecular structure chemistry (1): hybrid orbitals and valence shell electron pair repulsion rule	On the application of quantum chemistry to organic chemistry, we explain hybrid orbitals and valence shell electron pair repulsion rule (VSEPR rule).
14	日	分子構造化学 (2) : ヒュッケル法	ヒュッケル分子軌道法を詳説し、エテン、ブタジエン、ベンゼンを例にとりてヒュッケル近似を説明する。 $\pi$ 電子が関与する波動関数、電子密度、エネルギー準位について理解して、HOMO、LUMO の概念をつかむ。
	英	Molecular structure chemistry (2): Hückel method	The Hückel molecular orbital method will be described in detail, and the Hückel approximation will be explained using ethene, butadiene, benzene as an example. Understand the wave function, electron density, energy level involving $\pi$ electrons, and the con
15	日	原子、分子の構造とスペクトル	分光学の基礎を理解する。振動、回転分光法の基礎となる事項について説明し、フランク-コンドンの原理を用いて分子スペクトルについて概説する。電子スペクトルについて装置、ペール-ランベルトの法則を説明し、 $\pi^* \leftarrow \pi$ 、 $\pi^* \leftarrow n$ 遷移をヒュッケル近似と関連づける。スペクトル遷移と選択律について解説する。
	英	Structure and spectrum of atoms and molecules	Understand the fundamentals of spectroscopy. We will explain the fundamental items of vibration and rotational spectroscopy and outline the molecular spectrum using Frank-Condon principle. On the electron spectrum, explain the law of Veil-Lambert and rela

履修条件 Prerequisite(s)	
日	化学Ⅰの履修と理解を前提とする。化学Ⅰの単位を取得していなくても物理化学Ⅱは履修できるが、化学Ⅰの内容を前提とするので自学自習して補わなければ、物理化学Ⅱの単位取得は難しい。
英	This course is limited for students in Department of the Applied Chemistry. Comprehension of Fundamental Chemistry I is required.

授業時間外学習（予習・復習等） Required study time, Preparation and review	
日	授業中のスライドは、KIT Moodle システムにアップしてあるので予習、復習に活用すること。授業の前後に教科書、参考書等の該当部分を読んで、宿題の問題をノートにとき、解答を見て答え合わせする。moodle にある小テストを必ず解く。全問正解するまで何度でも受験できる。3時間程度は必要である。授業中に小テストを行うことがある。試験前には、指定される問題を解いて、授業内容を復習、確認する時間を必ず確保すること。
英	Slides from classes are uploaded to the KIT Moodle system, so please use them for preparation and review. Read the relevant sections of textbooks, reference books, etc. before and after class, write down homework problems in your notebook, check the answers, and check your answers. Be sure to solve quizzes on moodle. You can take the quizzes as many times as you like until you get all them correct. Approximately 3 hours are required including preparation and review. Some quizzes may be given during class. Before the exams, be sure to allocate time to solve the assigned questions and review and confirm the lesson content.

教科書／参考書 Textbooks/Reference Books	
日	(教科書)「アトキンス物理化学(上)」東京化学同人 978-4-8079-0908-7 (参考書)「量子化学」講談社 78-4-06-513330-9、「基礎化学」サイエンス社 978-4-7819-1270-7
英	(Text book) Atkins Physical Chemistry 1st volume, Tokyo Kagaku Dojin, 978-4-8079-0908-7 (Reference book) Quantum Chemistry, Kodansha Scientific Co. Ltd. 978-4-06-513330-9 Basic chemistry, Saiensu-sha Co., Ltd. 978-4-7819-1270-7

成績評価の方法及び基準 Grading Policy	
日	中間試験(50%)と学期末の試験(50%)で評価し、その合計点が60点以上を合格とする。それぞれのテストに、宿題の問題と同じ問題を60%以上出す。それらを「答え」だけでなく、式の導出を含めて正答できれば単位は取得できる。出席点は評価しないが、宿題ノートの提出状況と、moodleの小テストの解答、授業中に出了れた課題を評価して、最終成績に加味する。
英	Performance evaluation of this course will be conducted by midterm exam (50%) and final exam (50%). Students who acquire more than 60 points in the exams are regarded as having passed. Points for quiz during the class are added to the final score.

留意事項等 Point to consider	
日	質問のある学生は、月曜日の授業後の16:10に金折教員室(2号館北4F424号室)に来ること。メールで予約をしている学生を優先する。KIT Moodle システムを利用して授業を実施するので、情報科学センターからのメールアドレス(bXXXXXXX@edu.kit.ac.jp)をチェックすること。
英	Office hours is 16:10 on Monday. (2N-424) KIT moodle system is used, and the mail from the KIT education address should be checked.