

2026 年度シラバス

科目分類/Subject Categories			
学部等/Faculty	/工芸科学部 : /School of Science and Technology	今年度開講/Availability	/無 : /Not 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	/第2クォータ : /Second quarter
分類/Category	/化学 : /Chemistry	曜日時限/Day & Period	/:/

科目情報/Course Information				
時間割番号 /Timetable Number				
科目番号 /Course Number	15060127			
単位数/Credits	1			
授業形態 /Course Type	講義 : Lecture			
クラス/Class				
授業科目名 /Course Title	物理化学 II B : Physical Chemistry II B			
担当教員名 / Instructor(s)	/金折 賢二/高廣 克己 : KANAORI Kenji/TAKAHIRO Katsumi/			
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				

授業の目的・概要 Objectives and Outline of the Course	
日	物理化学 IA 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 や物理化学 IA 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 B are to understand deeply the chemical bond theory which was studied in the Physical Chemistry I A, 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 and the Physical Chemistry I A, 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	量子力学の諸原理を学習して、その背景を理解する。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。 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。 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。共有結合について電子状態から説明できる。 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。 混成軌道と原子価殻電子反発測について習得する。 ヒュッケル近似により π 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。

	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。
英	To learn the principles of quantum mechanics and understand the background. To learn the quantization of angular momentum and understand the relation with azimuth quantum number and magnetic quantum number. To learn the Aufbau principle of multiple electron atoms, and the electron arrangement. To solve hydrogen molecular ion by using molecular orbital method and learn wave function and energy level of bonding and antibonding orbitals. To explain electronic states by using molecular orbital methods for homonuclear diatomic molecules and heteronuclear diatomic molecules. To learn hybrid orbitals and valence bond shell electron repulsion rule. To explain the wave function, electron density and energy level of compounds with π electrons by Hückel approximation. To learn energy levels of molecular rotation, vibration and electronic transitions.

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	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
2	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
3	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_2^+ の構造、 σ 結合と π 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_2^+ 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_2^+ , σ bond and π 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
4	日	分子構造化学(1): 等核および異核二原子分子	水素分子 H_2 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_2 , 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
5	日	分子構造化学(2):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	Molecular structure chemistry (1): hybrid orbitals and valence shell electron pair repulsion rule
6	日	分子構造化学(3):ヒュッケル法と密度汎関数法	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。 ヒュッケル分子軌道法を詳説し、エテン、ブタジエン、ベンゼンを例にとってヒュッケル近似を説明する。 π 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 and Density functional theory	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 π electrons, and the con
7	日	原子、分子の構造とスペクトル	分光学の基礎とスペクトル遷移とその選択律について解説し、原子スペクトルの例として、水素原子のグロトリアン図とナトリウム原子の輝線スペクトルを説明する。二原子分子や振動、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の吸収スペクトルと蛍光およびりん光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て解説する。
	英	Structure and spectrum of atoms and molecules	We will discuss the basics of spectroscopy, including spectral transitions and selection rules. Examples of atomic spectra will cover hydrogen Grotrian diagrams and sodium emission lines. The course also introduces diatomic molecules and vibrational-rotat
8	日	まとめ(試験)	原子および分子構造とそれらのスペクトルとの関連を整理して理解を深める。
	英	Overview of the class (Examination)	Systematically understand the relationship between atomic and molecular structures and their spectra.
9	日		
	英		
10	日		
	英		
11	日		
	英		
12	日		
	英		
13	日		
	英		
14	日		
	英		
15	日		
	英		

履修条件 Prerequisite(s)		
日	化学Iと物理化学IAの履修と理解を前提とする。それらの単位を取得していなくても物理化学II Bは履修できるが、それらの内容を前提とするので自学自習して補わなければ、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 and Physical Chemistry IA is required. Physical Chemistry IIB may be taken even if the credits of Fundamental Chemistry I and Physical Chemistry IIA have not been obtained; however, as the course presupposes knowledge of these subjects, it will be difficult to earn the credit unless the missing material is supplemented through independent study.	

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)「量子化学 基礎から応用まで」講談社 78-4-06-513330-9 (参考書)「アトキンス物理化学 (上および下)」東京化学同人 978-4-8079-0908-7 「基礎化学」サイエンス社 978-4-7819-1270-7
英	(Text book) Quantum Chemistry, Kodansha Scientific Co. Ltd. 978-4-06-513330-9 (Reference book) Atkins Physical Chemistry 1st&2nd volume, Tokyo Kagaku Dojin, 978-4-8079-2078-5 (Japanese) Atkins' Physical Chemistry 12th edition, Oxford Univ. Press, 978-0-19-884781-6 (English) 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、教科書の例題と章末問題と同じ問題を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、授業中のワークシートおよび宿題ノートの提出状況と、moodle の小テストの解答、授業中に出了された課題を評価して、最終成績に加味する。
英	The course will be evaluated based on a midterm exam (50%) and a final exam (50%), with a total score of 60 points or higher required to pass. At least 60% of the questions in each test will be the same as those in the textbook. Students will receive credit if they can correctly answer these questions, including not only the "answers" but also the derivation of the formulas. Attendance will not be graded, but the submission of worksheets during class and homework notebooks, answers to Moodle quizzes, and assignments given during class will be evaluated and taken into consideration in the final grade.
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 (bXXXXXXXX@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.