

## 2026 年度シラバス

科目分類/Subject Categories			
学部等/Faculty	/大学院工芸科学研究科（博士前期課程）： /Graduate School of Science and Technology (Master's Programs)	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	/1～2年次 : /1st through 2nd Year
課程等/Program	/機能物質化学専攻 : /Master's Program of Functional Chemistry	学期/Semester	/秋学期 : /Fall term
分類/Category	/授業科目 : /Courses	曜日時限/Day & Period	/水 3 : /Wed.3

科目情報/Course Information				
時間割番号 /Timetable Number	61913301			
科目番号 /Course Number	61960002			
単位数/Credits	2			
授業形態 /Course Type	講義 : Lecture			
クラス/Class				
授業科目名 /Course Title	分子構造化学 : Molecular Structural Chemistry			
担当教員名 / Instructor(s)	/金折 賢二/三宅 祐輔 : /KANAORI Kenji/MIYAKE Yusuke			
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	量子化学を基盤として、分光学の原理、装置、スペクトルの解析方法を身につけ、分光学と分子構造との関係について深い洞察力をえることが授業の目的である。代表的な分光法である紫外可視分光および蛍光分光法、赤外分光法、磁気共鳴分光法に加え、質量分析と幅広くかつ詳細に講義し、演習する。どの研究分野においても大学院の研究において、これらの機器分析に関する知識は必要不可欠である。授業の1～5回目までは、学部の物理化学Ⅱの授業内容を復習し、毎回の小テストを解くことで理解を深める。6～9回目の授業では、電子遷移、振動遷移、磁
英	Based on quantum chemistry, the purpose of the class is to acquire the principles of spectroscopy, equipment, and methods for analyzing spectra, and to gain deep insight into the relationship between spectroscopy and molecular structure. We will give a wide and detailed lecture and practice on UV-visible spectroscopy, fluorescence spectroscopy, infrared spectroscopy, and magnetic resonance spectroscopy, and on mass spectrometry. Knowledge of these instrumental analyses is essential for graduate research in any field of study. Until the 1st to 5th lessons, we review the contents of the undergraduate "Physical Chemistry II" lesson and deepen your understanding by solving each quiz. In the 6th-9th class, while understanding items such as selection rule, Boltzmann distribution, and spin regarding electronic transition, vibration transition, and magnetic resonance, how they are used for electronic state and structural analysis of organic compounds. In the 10th to 15th sessions, we will learn the principle of two-dimensional nuclear magnetic resonance spectra and mass spectrometry, whose contents are related to those of the undergraduate "Spectrometric Identification of Organic Compounds" lesson.

学習の到達目標 /Learning Objectives	
日	量子論に基づき、原子構造やスペクトルを考えることができる。 量子力学の諸原理を学習して、その背景を理解する。 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>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>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>原子および分子の光吸収スペクトルの選択律と群論の関係を理解する。</p> <p>赤外およびラマン分光法の原理と基礎を理解し、スペクトルを解析する。</p> <p>電子スピン共鳴分光法の原理と基礎を理解し、スペクトルを解析する。</p> <p>核磁気共鳴分光法の原理と基礎を理解し、スペクトルを解析する。</p> <p>質量分析法の原理と基礎を理解し、スペクトルを解析する。</p>
英	<p>Able to consider atomic structure and spectrum based on quantum theory.</p> <p>Learning the principles of quantum mechanics and understanding their background.</p> <p>Deepening understanding of the Schrödinger equation, wave functions, and expectation values.</p> <p>Mastering the quantized representation of angular momentum and understanding its relationship with azimuthal quantum numbers and magnetic quantum numbers.</p> <p>Ability to explain the wave function, electron density, and energy levels of compounds with <math>\pi</math> electrons using the Hückel approximation.</p> <p>Understanding the relationship between the selection rules of atomic and molecular light absorption spectra and group theory.</p> <p>Understand the principles and fundamentals of infrared and Raman spectroscopy and analyze the spectra.</p> <p>Understand the principles and fundamentals of electron spin resonance spectroscopy and analyze the spectra.</p> <p>Understand the principles and fundamentals of nuclear magnetic resonance spectroscopy and analyze the spectra.</p> <p>Understand the principles and fundamentals of mass spectrometry and analyze the spectra.</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	量子力学の一般概念	古典力学、前期量子論を踏まえて、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理解する。
	英	General concepts of quantum mechanics	Based on classical mechanics and early quantum theory, we will explain the flow of matter waves of De Broglie and explain the duality of waves and particles, and then discover the electron spin and explain the significance of Pauli's exclusion principle.
2	日	シュレーディンガーの波動方程式	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について説明して、変数分離法、規格化、エルミート演算子と波動関数の直交を解説する。シュレーディンガー方程式に用いられる近似について説明する。授業の後半では、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）、井戸型ポテンシャル内の粒子の運動について解説する。
	英	Schrodinger's wave equation	Explains the construction of the Schrodinger equation and the requirements of the wavefunction, and explains the variable separation method, normalization, and the orthogonality between the Elmeat operator and the wavefunction. The approximation used for
3	日	調和振動子と水素原子の波動関数	ポテンシャルが存在する条件でのシュレーディンガー方程式として、調和振動子と水素原子のシュレーディンガー方程式を学ぶ。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。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
	英	Wave functions of harmonic oscillator and hydrogen atom	Learn the Schrodinger equation of a harmonic oscillator and a hydrogen atom as a Schrodinger equation with potential energy. Learn the polar coordinate display of the Schrodinger equation, and the relationship between the spherical harmonics and the radia

4	日	軌道角運動量とスピン角運動量の合成と水素原子の微細構造	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。多電子原子の軌道エネルギー計算方法を簡単に説明する。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表記について理解する。
	英	Orbital and spin angular momenta and fine structure of hydrogen atom	Regarding the angular momentum and magnetic properties, the synthesis of the angular momentum and the magnetic moment, the angular momentum, and the analysis of the fine structure of the emission line spectrum of the hydrogen atom will be described. The m
5	日	分子軌道	量子化学の有機化学への応用について、混成軌道、原子価殻電子対反発則 (VSEPR 則) を簡単に説明した後、エテン、ブタジエン、ベンゼン、ナフタレンを例にとっ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。次の講義の電子遷移についての基本理解を深める。
	英	Molecular orbital method	Molecular orbital method
6	日	選択律と群論	スペクトル遷移と選択律について解説する。原子の電子構造および磁気モーメント、複雑な原子のエネルギー準位と微細構造を理解し、群論の初歩を紹介する。水素原子のグロトリアン図、Na 原子のゼーマン効果によるスペクトル線の分裂、ブタジエンの電子遷移を例にとって説明する。
	英	Selection rule and group theory	We will explain the spectral transition and the selection rule. Understand the electronic structure and magnetic moment of an atom, the energy level and fine structure of a complex atom, and introduce the basics of group theory. The Grotrian diagram of a
7	日	分子分光学 1 : 電子遷移スペクトルと純回転スペクトル	分子の電子吸収スペクトルと Franck-Condon 原理、単結合のみをもつ分子の電子スペクトル、二重結合、三重結合をもつ分子、光電子分光法について概説する。分子の回転エネルギー準位と回転スペクトル、振動エネルギーの量子化をボルツマン分布とともに学ぶ。
	英	Molecular spectroscopy 1: Electronic transition spectrum and pure rotation spectrum	The electron absorption spectrum and Franck-Condon principle of a molecule, the electron spectrum of a molecule having only a single bond, the molecule having a double bond and a triple bond, and photoelectron spectroscopy are outlined. Learn the rotation
8	日	分子分光学 2 : 赤外・ラマンスペクトル	二原子分子の赤外線吸収スペクトル、多原子分子の基準振動、単原子分子の赤外吸収スペクトルとラマンスペクトル、特性振動、回転異性体について概説する。
	英	Molecular spectroscopy 2: Vibrational and rotational spectra	Infrared absorption spectra of diatomic molecules, normal mode analysis of the vibrations of polyatomic molecules, and characteristic vibrations in vibration infrared absorption spectra are outlined. The principle and application of the Raman spectrum wil
9	日	分子分光学 3 : 磁気共鳴スペクトル	電子スピンと核スピンのゼーマン効果から磁気共鳴の原理について説明する。電子スピン共鳴 (ESR) および核磁気共鳴 (NMR) について基本的なパラメーターを紹介して、スペクトル解析の基礎を説明する。
	英	Molecular spectroscopy 3: Magnetic resonance spectroscopy	The principle of magnetic resonance will be explained from the Zeeman effect of electron spin and nuclear spin. The basic parameters of electron spin resonance (ESR) and nuclear magnetic resonance (NMR) are introduced to explain the basics of spectral ana
10	日	$^1\text{H}$ NMR 分光法	化学シフト、積分値、J カップリングの理解を深め、アミノ酸およびヌクレオシドの構造式を見ながら、 $^1\text{H}$ -NMR スペクトルの同定を練習する。分子式から不飽和度や環状構造の個数を決める不足水素指標、脂肪族および芳香族有機化合物の $^1\text{H}$ -NMR スペクトルの解析のコツを学ぶ。
	英	Analysis of $^1\text{H}$ NMR spectroscopy	Deepen your understanding of chemical shifts, integrals, and J-coupling, and practice identifying $^1\text{H}$ -NMR spectra while looking at the structural formulas of amino acids and nucleosides. Learn the deficiency hydrogen index that determines the degree of

			uns
11	日	多核 NMR 分光法	有機化合物の構造同定に必須である炭素を観測する $^{13}\text{C}$ -NMR について解説する。 $^{13}\text{C}$ -NMR の理解に必要なプロトン-デカップリング、核オーバーハウザー効果、緩和時間などの意味を理解する。炭素の級を区別する DEPT 法を理解する。 $^{13}\text{C}$ 以外の多核 NMR 測定 ( $^{19}\text{F}$ , $^{29}\text{Si}$ , $^{31}\text{P}$ ) についても簡単に解説する。
	英	Multinuclear NMR spectroscopy	We will explain $^{13}\text{C}$ -NMR, which observes carbon, which is essential for structural identification of organic compounds. Understand the meanings of proton-decoupling, nuclear Overhauser effect, relaxation time, etc., which are necessary for understanding $^{13}\text{C}$
12	日	有機化合物の $^1\text{H}$ および $^{13}\text{C}$ NMR による同定	演習問題を通して官能基のケミカルシフト値、積分値、J-カップリングパターンから有機化合物の同定を演習する。NMR スペクトルをどのように同定したかを受講者がプレゼンする。
	英	Identification of organic compounds by $^1\text{H}$ and $^{13}\text{C}$ NMR	The participants should present how to identify the compounds of A-W whose molecular formula and $^1\text{H}$ NMR spectrum in $\text{CDCl}_3$ were given in the previous homework. Through exercises, we will practice the identification of organic compounds from the chemical shift
13	日	二次元 NMR	二次元 NMR 法について解説する。同核種相関 2D-NMR (COSY, TOCSY) および異核相関 2D-NMR (HMQC, HMBC) による有機化合物のシグナル同定の仕方を演習する。核オーバーハウザー効果 (NOE) を説明してペプチドの連鎖帰属法について解説する。
	英	Two-dimensional NMR spectroscopy	The two-dimensional NMR methods will be explained. We will practice how to identify signals of organic compounds by homonuclear correlation 2D-NMR (COSY, TOCSY) and heteronuclear correlation 2D-NMR (HMQC, HMBC). The nuclear overhauser effect (NOE) will be
14	日	質量分析	質量分析計の原理、イオン化法と質量分離装置の種類について説明する。窒素ルールと同位体ピークについて学ぶ。
	英	Mass spectrometry	The principle of mass spectrometer, ionization method and types of mass separator will be explained. Learn about nitrogen rules and isotope peaks.
15	日	まとめ	授業の振り返りと質問事項に対するディスカッション
	英	Review	Review of class and discussion on questions

## 履修条件 /Prerequisite(s)

日	
英	

## 授業時間外学習 (予習・復習等) /Required study time, Preparation and review

日	次回に実施される小テストのための復習や、レポート作成に毎回3時間程度は必要である。
英	It takes about three hours each time to review for the next quiz and write reports.

## 教科書/参考書 /Textbooks/Reference Books

日	(教科書)「量子化学」講談社 78-4-06-513330-9 (参考書)「アトキンス物理化学 (上下)」東京化学同人 978-4-8079-0908-7 (参考書)「有機化合物のスペクトルによる同定法(第8版)」(Silverstein, Webster 著、東京化学同人)
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) 「Spectrometric identification of organic compounds」 Robert M. Silverstein, Francis X. Webster, David Kiemle

## 成績評価の方法及び基準 /Grading Policy

--	--

日	授業中に実施する小テスト (60%)、講義内容に関連する課題に対するレポート(30%)、発表 (10%)から評価し、60点以上を合格とする。
英	Grades will be assessed based on quizzes given during class (60%), reports on assignments related to the lecture content (30%), and presentations (10%). A score of 60 or above is considered a pass.

留意事項等 /Point to consider	
日	<p>授業は講義室で対面で英語で実施し、授業資料、講義、小テストなど全て英語のみである。</p> <p>授業の指示や、資料や小テストは moodle を使用する。授業ファイルは p d f で moodle にアップしており、ほぼすべての授業において、受講生は moodle にある小テストを授業時間内に受験する必要があるため、PC もしくはスマートフォンを持参する必要がある。</p> <p>レポート課題が課されてるが、提出課題については、日本語で記述してもよい。</p> <p>12回目の授業では、受講者は英語で発表する必要がある。</p>
英	<p>Classes are held face-to-face in lecture halls in English, with all class materials, lectures, quizzes, etc. in English.</p> <p>Moodle is used for class instructions, class materials, and quizzes. Class files are uploaded to Moodle in PDF format, and in almost all classes, students are required to take quizzes on Moodle during class time, so students are required to bring a PC or smartphone with them.</p> <p>Students are assigned to write reports, but may write them in Japanese.</p> <p>In the 12th class, students are required to make a presentation in English.</p>