

教科目名 量子材料学 (Quantum Materials Science)

学科名・学年 : 機械・環境システム工学専攻 2年

単位数など : 選択 2単位 (後期1コマ, 学習保証時間 22.5時間)

担当教官 : 松本佳久

授業の概要		
これからの材料学では量子論による単なる定性的な理解だけでは満足なものではなく、物質探索や実験計画に積極的に量子論が使われると考えられる。本授業では、新材料を開発していく場合に有効となる電子状態や化学結合の観点から、材料の物性や特性の理解を行おうというものである。		
到達目標		大分高専目標 (E1), JABEE 目標 (d2a)
(1) 材料科学に関する量子力学の初歩 (必要最低限の量子力学) を理解する。 (2) 物質の物理的・化学的性質の大部分がその電子状態によって決まっていることを理解する。 (3) 分子軌道法の概略を理解する。 (4) 材料の物性に強く関わってくる欠陥構造や表面・界面における電子状態を理解する。		
回	授 業 項 目	内 容
1	1. 量子材料学の概要	電子が実際の物質中でどのような役割を果たしているかを、基礎的に理解することの意義を学ぶ。
1, 2	2. 波動方程式と波動関数	電子の振る舞いが波動関数で表されること、その波動関数が電子のエネルギーとポテンシャルでどのように決まるかを理解する。
2-4	3. 原子の構造と電子状態	水素原子の構造、多電子原子の構造について考え、後者の原子について、シュレディンガー方程式を解くための近似法を学ぶ。
5	4. 元素と周期律	元素の周期律表の理解と電子配置、原子価、電気陰性度、原子半径、電子親和力などを吟味する。
5-7	5. 分子の電子状態	分子軌道論の考え方の紹介し、また化学結合の概念を学ぶ。
8, 9	6. 分子から固体へ	固体の電子状態のほとんどすべてが分子の電子状態の延長線上で理解可能であることを学ぶ。
10, 11	7. 無機結晶の構造と結合状態	無機結晶の原子配列について述べ、実際の無機化合物の特性が、それに含まれる元素の組み合わせとその配列によって決定されていることを理解する。
12	8. 典型金属、遷移金属の電子構造と欠陥・不純物準位	典型金属および遷移金属の電子の状態密度の比較を行い、その特徴を理解する。また、結晶中の欠陥や孤立不純物が存在した場合の局所的な電子構造変化を学ぶ。
13	9. 表面と界面	表面や界面に特有の電子状態を理解し、結合状態の違いがマクロ的な変化としてどのように関与しているかを実例を通して学ぶ。
14	後期期末試験	
15	後期期末試験の解答と解説	
		自身の理解力を分析し、わからなかった部分を理解する
履 修 上 の 注 意	量子材料学は材料特性の本質を理論ベースで構成した教科なので、全ての理解のためにはある程度の慣れが必要であると考えられる。そのため、十分な復習が必要である。配布するプリントは、授業の要点を書き加えたりして、整理してファイリングしてまとめておくことよい。また、実力をつけるため適宜レポート課題を出す。定期試験には「材料学」などに関連した内容も含む。	
教 科 書	足立裕彦, 田中功 共著, 「量子材料学の初歩」, 三共出版	
参 考 図 書	足立裕彦, 森永正彦, 那須三郎 共著, 「金属材料の量子化学と量子合金設計」, 三共出版	
関 連 科 目	応用物理 および , 材料学, 塑性加工学	
評 価 方 法	定期試験の成績(80%), レポート・課題の提出(20%)により評価する。また、授業態度により評価点からその 20%を上限として減点する。	