

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

専攻名・学年 : 機械・環境システム工学専攻 2 年 (教育プログラム 第 4 学年 ○科目)

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)

担当教員 : 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. 本講義では, 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.

達成目標と評価方法

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 (必要最小限の量子力学) が理解できる. (定期試験と課題)
 (2) 物質の物理的・化学的性質の大部分が電子状態によって決まっていることが理解できる. (定期試験)
 (3) 分子軌道法の概略を理解できる. (定期試験と課題)
 (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が理解できる. (定期試験と課題)

回	授 業 項 目	内 容	理解度の自己点検	
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理解できる.	【理解の度合い】	
1 2	2. 波動方程式と波動関数	○電子の振舞いが波動関数で表され, 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 3 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, シュレディンガー方程式を解くための近似法が理解できること.		
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, 電子親和力などが吟味できる.		
6 7	5. 分子の電子状態	○分子軌道論の考え方, 化学結合の概念が理解できる.		
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で理解可能であることを知る.		
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 13	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が理解できる.		
14	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事例を通して理解できる.		
15	後期期末試験			【試験の点数】.....点
	後期期末試験の解答と解説			
履修上の注意	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, 適宜ファインリングすること.			【総合達成度】
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	足立裕彦ほか著, 「金属材料の量子化学と量子合金設計」, 三共出版. 資料プリント配布.			
事前準備学習	代表的物質および金属材料の結晶構造について学習し, 結晶方位の表現法などを復習すること. また化学結合の概念を化学の教科書等で復習し, 電子の振る舞いを理解しておくこと.			
関連科目	材料学Ⅱ(M科), 化学Ⅰ, 弾性力学, 塑性加工学, 材料強度学			
総合評価	達成目標の(1)～(4)について試験と課題で評価する. 総合評価＝0.8×(定期試験の点)+0.2×(課題点) 総合評価が 60 点以上を合格とする.		【総合評価】.....点	

