科目ナンバリング	G-LAS11 80010 LJ60						
授業科目名 <英訳>	分光解析化学 Spectroscopic Analysis for Chemistry			担当者所属 職名・氏名	化学研究所　教授　　長谷川　健		
群	大学院横断教育科目群	分野(分類)	自然科学系			使用言語	日本語
旧群		単位数	2単位	週コマ数	1コマ	授業形態	講義（対面授業科目）
開講年度・開講期	2024・後期	曜時限	火2	配当学年	大学院生	対象学生	理系向

（理学研究科の学生は，全学共通科目として履修登録できません。所属部局で履修登録してください。）

[授業の概要・目的]

界面の吸着分子や薄膜中の分子構造を定量的に解析するのに，振動分光学はきわめて強力な解析手段である．有機半導体薄膜，液晶，化学・バイオセンサーといった応用分野もちろん，分子集合系が示す独特な物性を構造と関連付けて理解するのに，振動分光が使いこなせるとよい．本講義では，赤外分光法を中心に，分子振動の物理，選択律の量子論及び電磁気学，薄膜分光の物理，光学配置の異なる測定によって得られるスペクトルの相互理解，多変量解析などを学ぶ．薄膜・界面の化学に関わる多くの大学院生にとって，身近な分光器を研究の主力にするべく，学部の講義ではほとんど語られることのない分光学の基礎をまとめて把握することを目的とする．

[到達目標]

もっとも身近な分光器のひとつフーリエ変換赤外分光器（FT-IR）を使いこなし，分子のコンフォメーション，パッキング，官能基ごとの配向，結晶多形の解析および分子間相互作用の定量化などが自在にできるようになり，単分子膜レベルの超薄膜試料の解析に自信をもって取り組めるようにする．また，分光の基礎を知らないと誰でも簡単に陥る過ちを把握し，間違いのない定量的な議論ができるようする．

[授業計画と内容]

1.赤外スペクトルからなにがわかるか：　分子コンフォメーション，パッキング，会合，イオン性化合物の
　塩形成など
2.連成振動子解析の基礎：　基準座標と基準振動，連成振動子から見る赤外およびラマン分光法の違い
3.選択律：　フェルミの黄金律，群論，Beer-Lambert則の電磁気学的理解
4.フーリエ変換分光の詳細とFT-IRの基本パラメータ
5.薄膜分光の基礎：　試料の厚みを波長より十分に減らすと何が起こるのか
6.種々の薄膜分光法：　各種測定法と電磁気学的表現による定量的な理解
7.種々の薄膜分光の相互理解を可能にする信号理論：　コンボリューションの考え方，Kramers-Kronigの関係
8.多変量解析：　スペクトルの縦軸を生かす
9.多角入射分解分光（MAIRS）法：　薄膜中の分子配向の定量的解析

[履修要件]

特になし

[成績評価の方法・観点]

出席．小テストを課す場合もある．

分光解析化学(2)へ続く↓↓↓

分光解析化学(2)

[教科書]

配布資料を利用．資料はKULASISで事前配布．

[参考書等]

（参考書）

長谷川健・尾崎幸洋 『赤外・ラマン分光分析』（共立出版）ISBN:978-4-320-04458-6

Takeshi Hasegawa 『Quantitative Infrared Spectroscopy for Understanding of a Condensed Matter』（Springer）ISBN:978-44315649115

[授業外学修（予習・復習）等]

なし

[その他（オフィスアワー等）]