実験	チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている。		
1	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・⑤参考文献 が全て記載されている.		
	(5) 参考文献に、Web 媒体を使用していない。		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
•	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している.	2		
a	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している.	2		0
			(規格グレードやファクター等, 試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)			U
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		
	(1)	「アトキンス 物理化学要論 第7版」p.148 "束一的性質" を参照し,固液平衡状態(融点)において成立する化学ポテンシャルの関係式から,(1.1)式を導出せよ.	「アトキンス 物理化学要論 第7版」p.148 "束一的性質" を参照し,正しく導出している.	6		
	(2)	グルコース溶液(試料番号 1 -3)の質量モル濃度 b_B [mol kg $^{ ext{-}1}$] を表 1.1 に沿って求めよ.	秤量データを適切な桁数で記載している.	6		
			計算過程を示しつつ、全てのグルコース溶液について質量モル濃度を有効桁を含めて正しく計算	6		
			している.	U		
	(3)	(1.3)式にしたがって,グルコース溶液(試料番号 $1-3$)の理論的な凝固点降下 ΔT_{f} を求めよ.	計算過程を示しつつ,全てのグルコース溶液について理想的な凝固点降下を有効桁を含めて正し	6		
			く計算している.ただし K _f には予習課題で調査した文献値を用いること.	U		
	(4)	純水およびグルコース溶液(試料番号 1-3)について冷却曲線(図 1.3 参照)を作成せよ.	適切なグラフが作成されている。	6		
8	(5)	(4) の冷却曲線から純水の凝固点 T _f を読み取り,デジタル温度計の系統誤差を校正せよ.	過程を示しつつ,純水の凝固点を有効桁を含めて正しく読み取っている.	6		0
		また,グルコース溶液について校正した凝固点 T_f を読み取り,凝固点降下 ΔT_f を求めよ.	過程を示しつつ,全てのグルコース溶液について校正した凝固点を有効桁を含めて正しく読み	6		Ů
			取っている.	U		
			計算過程を示しつつ,全てのグルコース溶液について,凝固点降下を有効桁を含めて正しく計算	6		
			している.	Ů		
	(6)	純水およびグルコース溶液(試料番号 1 -3)について質量モル濃度 b_B に対する凝固点降下 ΔT_f の	適切なグラフが作成されている.	6		
		関係(図 1.4 参照)をプロットし,水のモル凝固点降下定数を求めよ.	計算過程を示しつつ,水のモル凝固点降下定数を有効桁を含めて正しく計算している.	6		
			予習課題で調査した文献値と比較し、実験精度について考察している。	10		
	, ,	スクロース水溶液で同様な実験を行った場合, (6) のプロットはどのようになると考えられるか. 説明せよ.	凝固点降下の性質から、(6)のプロットがどのようになるか説明している。	10		
4	(1)	結論	本実験で得られた結論を、自分の言葉で説明している。	6		0
6	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

実験	チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている.		
2	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・❹結論・❺参考文献 が全て記載されている.		
	(5) 参考文献に、Web 媒体を使用していない.		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
a	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
•	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している.	2		
2	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している。 (規格グレードやファクター等, 試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)	2		0
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		
	(1)	表 2.1 からメタノールのモル分率を算出せよ.	秤量データを適切な桁数で記載している.	6		
			計算過程を示しつつ、全ての試料溶液についてシクロヘキサン/メタノールの物質量を有効桁を含めて正しく計算している.	6		
			計算過程を示しつつ,全ての試料溶液についてメタノールのモル分率を有効桁を含めて正しく計算している.	6		
	(2)	表 2.1-3 を用いて,シクロヘキサン/メタノール系の温度-組成図(図 2.1 参照)を作成せよ.	白濁の消失/出現温度について、それらの平均と共にデータを適切な桁数で記載している.	6		
			実測値と与えられた文献値(表2.3)を用いて、適切なグラフが作成されている.	6		
8	(3)	シクロヘキサン/メタノールを 7.0 [g]: 3.0[g] で混合させることを考える.20 ℃ で攪拌後,静置	本課題におけるメタノールのモル分率を有効桁を含めて正しく計算している.	6		0
		した際,その混合系は二相に分離することを,温度-組成図および各分子の性質から説明せよ.	(2) のプロットから,ギブズの相律に言及しつつ,二相に分離することを正しく説明している.	10		
			各分子の性質から,分子間相互作用について言及しつつ,二相に分離することを説明している.	10		
	(4)		(2) のプロットを使用し,てこの規則を適用するために必要な作図が正しくできている.	6		
		また,てこの規則を用いて,相分離した二相のモル比を求めよ.	計算過程を示しつつ,各相のメタノールのモル分率が正しく読み取られている.	6		
			計算過程を示しつつ,相分離した二相のモル比を正しく計算している.	6		
	(5)	本実験では、昇温により $P=2 \rightarrow 1$ になる系を対象とした.昇温により、 $P=1 \rightarrow 2$ になる系にはどのようなものがあるか、調査せよ.	「アトキンス 物理化学要論 第7版」テーマ4 を参照し,正しく調査している.	6		
4	(1)	結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
6	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

 合計点:
 0

 評価:
 不合格

実験		チェック項目 評		
	(1)	ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号 <u>学籍番号_氏名.docx</u>)		
	(2)	鋳型ファイルを用いている。		
3	(3)	鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4)	●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・●参考文献が全て記載されている。		
	(5)	指定のエクセルファイルを提出している。		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		
0	(2)	目的	本実験の目的を、自分の言葉で説明している。	3		0
	(1)	ソフトウエア	本実験で使用したソフトウエアをバージョンも含めて全て記載している.	2		0
0	(2)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		0
	(1)	配布した 183 化合物の学習データセットについて,各変数(分子量,元素 H/C/N/O の含有数,	全ての変数について,標本数,平均,標準偏差,最小値,第1四分位数,中央値,第3四分位数,	2		
		元素 H/C/N/O の含有率,原子電荷の最大値,原子電荷の最小値,双極子モーメント,分極率体	最大値を正しく算出している。	2		
		積、HOMO,LUMO,沸点)の標本数,平均,標準偏差,最小値,第1四分位数,中央値,第3四		2		
		分位数、最大値を求めよ、また、箱ひげ図を作成せよ、これら変数のデータ分布はそのまま比較	与えられた変数のデータ分布はそのまま比較して良いか,変数のスケール(単位)の観点から考	2		
			察している.			1 1
	(2)		標準化の方法について,計算過程を説明している.	2		
			全ての変数について,変数の標準化を実施している.	2		
			全ての変数について,標本数,平均,標準偏差,最小値,第1四分位数,中央値,第3四分位数,	2		
			最大値を正しく算出している。			4 1
		HOMO, LUMO, 沸点)の標本数, 平均, 標準偏差, 最小値, 第1四分位数, 中央値, 第3四分位		2		
			データ分布を比較し、回帰分析に利用すべきでない変数を、理由と共に過不足なく挙げている。	2		
		に利用すべきでない変数はどれか、理由と共に述べよ。	(理由がないものは NG)	<u> </u>		<u> </u>
	(4)		エクセルの分析ツールを使用し、線形単回帰式を正しく求めている。	2		4
			「有意F」の意味を説明しつつ、回帰式の有意性を判定している。	2		4
		to any transition of the		2	-	ļ .
			適切なグラフが作成されている。	2		4 I
١.	(5)		計算過程を示しつつ、R ² および MAE を求め、線形単回帰式の性能を評価している。	2	-	
0	(5)	(3) で統計的に有意と考えられた説明変数をすべて使用し、標準化した沸点を推定するための線形 重回帰式を求めよ、また、回帰式の有意性を「有意F」により判定せよ、「P-値」により、統計		2		- 0
		単四所式を示める。また、回所式の有意性を「有意で」により刊定せる。「F-iii」により、続計 的に有意な説明変数を決定せよ。(判定方法はオンデマンド動画で説明している。)	「有意F」の意味を説明しつつ、回帰式の有意性を判定している。			4
		的に有意な説明変数を決定せよ。 (判定方法はオンテマント 動画で説明している。)	「P-値」の意味を説明しつつ、統計的に有意な説明変数を過不足なく挙げている。(理由がないものは NG)	2		
	(6)	(5) で決定した有意な説明変数をすべて使用し、標準化した沸点を推定するための線形重回帰式を		2		
		求めよ。また、回帰式の有意性を「有意 F」により判定せよ。「P-値」により、すべての説明変	·	2		1 1
			「P-値」の意味を説明しつつ、すべての説明変数が統計的に有意であることを説明している。	2		
		· · ·	計算過程を示しつつ、元のスケールに戻した回帰値を正しく求めている。	2		
		フィー・ファイーとは、1、40より141/11とよりの、187/12年十四川2001年11日とより	適切なグラフが作成されている。	2		
			計算過程を示しつつ、R ² および MAE を求め、線形単回帰式の性能を評価している。	2		1
	(7)		回帰係数を比較し、沸点の推定に重要な説明変数を、重要なものから4つ特定している。	2		
	(-,	よ。それらの説明変数はなぜ重要なのか,各変数が沸点に与える影響を,分子間相互作用の観点		Ť		
		から考察し説明せよ	ら」説明している。	2		
	(8)	各々に配布したテストデータセットに含まれる3 化合物の分子構造を図示せよ。説明変数を標準	ChemDraw JS を用いて、テストデータセットの 3 化合物の分子構造を図示している。	3		1
		化し, (6) で得られた線形重回帰式を用いて沸点を予測せよ.予測した沸点を,実測値と比較して		7		
		考察せよ.	計算過程を示しつつ,線形重回帰式から沸点の予測値(回帰値)を正しく計算している.	7		1]
			計算過程を示しつつ,元のスケールに戻した回帰値を正しく求めている.	7		1]
			データセットに含まれる実測値と比較し,作成した線形重回帰式の精度を考察している.	10		
0	(1)	結論	本実験で得られた結論を、自分の言葉で説明している。	6		0
9	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している。	2		0

合計点: 0 評価: 不合格

実験	チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている.		
4	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている.		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・⑤参考文献が全て記載されている。		
	(5) 参考文献に、Web 媒体を使用していない。		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		- 0
U	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している。	2		
a	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している。	2		0
•			(規格グレードやファクター等,試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)			U
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		
			計算過程を示しつつ,NaOH滴下量の平均と標準偏差を有効桁を含めて正しく計算している.	6		
			計算過程を示しつつ,NaOH水溶液,酢酸水溶液の濃度を有効桁を含めて正しく計算している.	6		
	(1)	各溶液について測定した電気伝導率からモル伝導率を算出し 表 4.4-4.7 を埋めよ. なお, セル校	測定データを適切な桁数で記載している.	5		
		正後の電気伝導率 κ'は、以下の式で求められる.	計算過程を示しつつ,全ての試料溶液について校正後の電気伝導率を有効桁を含めて正しく記載	5		
			している.	J		
			計算過程を示しつつ,全ての試料溶液についてモル伝導率を有効桁を含めて正しく計算してい	5		
			3 .	J		
		各溶液のモル伝導率 Λ_{m} [mS m^2 mol^{-1}] をモル濃度 c [mol L^{-1}] の平方根に対してプロットせよ.強		5		
6		電解質溶液については,(4.3)式を参考に $\Lambda_{\rm m}$ °を求めよ.結果を,予習 (2) で算出した文献値と	計算過程を示しつつ,強電解質溶液の極限モル伝導率を有効桁を含めて正しく計算している.	5		0
•		比較して考察せよ。	予習課題で算出した文献値と比較し,実験精度について考察している.	7		U
	(3)	予習 (3) で立てた式を利用して、弱電解質水溶液の Λ _m °を求めよ. 結果を、予習 (3) で算出した	計算過程を示しつつ,弱電解質溶液の極限モル伝導率を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
		文献値と比較して考察せよ.	予習課題で算出した文献値と比較し,実験精度について考察している.	7		
	(4)	各濃度について酢酸の電離度 $lpha$ を求め,モル濃度 c [mol L $^{-1}$] に対してプロットせよ.	計算過程を示しつつ, 酢酸の電離度が計算されている.	5		
			適切なグラフが作成されている.	5		
	(5)	アルカリ金属イオンの伝導率が Li ⁺ < Na ⁺ < K ⁺ となる理由を,イオン半径および流体力学の観点	「アトキンス 物理化学要論 第7版」5H•3 を参考に、問を「イオン半径および流体力学の観点か	7		
		から考察せよ.	ら」考察している.	'		
	(6)	H ⁺ のイオン伝導率が,その他陽イオン(Li ⁺ ・Na ⁺ ・K ⁺ など)に対して異常に大きい理由を考察	「アトキンス 物理化学要論 第7版」5H•3 を参考に,問を「プロトン移動のメカニズムの観点か	7		
		せよ.	ら」考察している.	/		
4	(1)	結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
6	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

 合計点:
 0

 評価:
 不合格

実験	チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている.		
5	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている.		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・●参考文献 が全て記載されている.		
	(5) 参考文献に、Web 媒体を使用していない。		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
•	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
•	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している.	2		
a	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している.	2		0
			(規格グレードやファクター等,試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)			
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		
	(1)	表 5.2 を埋めよ.ただし,SDS 水溶液の密度は,濃度によらず $1\mathrm{kg}L^1$ とする.	モル濃度・滴下量・液滴の質量について計算過程を示しつつ,全ての試料について有効桁を含め	11		
			て正しく表を埋めている.			
	(2)	外半径 $_{\Gamma}[m]$ のガラス管から,体積 $_{\Gamma}[m^3]$ の液滴が落下する際の補正係数 $_{\phi}$ は,表 $_{\Gamma}$ 5.3 で与えら	計算過程を示しつつ,滴数計の外半径を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
		れる.表 5.3 を用いて,各濃度における表面張力 γ $[{\sf N}\ {\sf m}^{-1}]$ を算出せよ.	計算過程を示しつつ,全ての試料について補正係数を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
			計算過程を示しつつ,全ての試料について表面張力を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
			適切なグラフが作成されている.	6		
		剰量を求めよ.	計算過程を示しつつ,CMC を有効桁を含めて正しく計算している.	6		
			計算過程を示しつつ,測定温度における表面過剰量を有効桁を含めて正しく計算している.	6		
6			計算過程を示しつつ,表面過剰量の逆数から,界面において一分子が占める表面積 [Å ²]を有効桁			0
			を含めて正しく計算している.(1 mol あたりの表面積ではなく,一分子あたりの表面積であることに注意.)	6		
			SDS の疎水基(アルキル基)の表面積は 20.1 A²,親水基(OSO₃⁻)の表面積は 13.4 A² である.			
			本実験の結果得られた「界面において一分子が占める表面積」が,これらに比べてずっと大きく	10		
			なる理由を正しく説明している.			
			1-ブタノールについて同様な実験を行ったとすると,「界面において一分子が占める表面積」は			
			どのようになると考えられるか,正しく考察している.なお,1-ブタノールの親水基(OH)の表	10		
			面積は 12.3 A ² である.			
	(4)	(3) で、SDS 水溶液の濃度が CMC 以上においては、表面張力が減少しない理由を述べよ.	問いについて正しく説明している。	10		
4	(1)	結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
6	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

実験	チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている。(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている.		
6	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・❹結論・❺参考文献 が全て記載されている.		
	(5) 参考文献に、Web 媒体を使用していない。		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
U	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している.	2		
a	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している.	2		0
•			(規格グレードやファクター等,試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)	۷		U
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		
			秤量データを適切な桁数で記載し,計算過程を示しつつ,全ての試料について秤量した活性炭を	5		
			有効桁を含めて正しく計算している.	5		
			計算過程を示しつつ,NaOH水溶液,酢酸水溶液の濃度を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
	(1)	表 6.5 を埋めよ.	吸着試験後の滴定結果について,全ての試料溶液について適切な桁数で表にまとめている.	5		
			計算過程を示しつつ,有効桁を含めて正しく表 6.5 を埋めている.	5		
	(2)	平衡濃度 C_{eq} に対して C_{eq}/n をプロットし,予習 (2) で導出した一次関数に対して最小二乗法で	計算過程を示しつつ,すべての試料溶液について C _{eq} /n を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
		フィッティングし,ラングミュアの吸着等温式のパラメータ $lpha$ を決定せよ.また,活性炭に対す	適切なグラフが作成されている.	5		
		る酢酸分子の飽和吸着量 n_∞ [mol g^{-1}] を求めよ.	計算過程を示しつつ、ラングミュアの吸着等温式のパラメータα および活性炭に対する酢酸分子	5		
			の飽和吸着量 n _∞ を有効桁を含めて正しく算出している。	5		
	(3)	平衡濃度 C_{eq} の自然対数に対して $\ln n$ をプロットし,予習 (2) で導出した一次関数に対して最小	計算過程を示しつつ, すべての試料溶液について In n を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
8		二乗法でフィッティングし,フロイントリッヒの吸着等温式のパラメータ β,b を決定せよ.	適切なグラフが作成されている。	5		0
			計算過程を示しつつ,フロイントリッヒの吸着等温式のパラメータ eta , eta を有効桁を含めて正し	E		Ŭ
			く算出している。	5		
	(4)	平衡濃度 C_{eq} に対して活性炭 $1g$ あたりに吸着した酢酸の量 $n[molg^{-1}]$ をプロットせよ. (2),	計算過程を示しつつ,(2),(3)で算出したパラメータを用いて,ラングミュアの等温式およびフ			
		(3) で算出したパラメータを用いて,ラングミュアの等温式およびフロイントリッヒの吸着等温式	ロイントリッヒの吸着等温式から、各濃度における n の理論値を有効桁を含めて正しく算出して	5		
		で算出した n を重ねて示せ.本実験結果は,どちらの理論式により合致したか.また,その結果	いる.			
		から何が言えるだろうか.	適切なグラフが作成されている.	5		
			本実験結果が,どちらの理論式により合致したか,また,この結果から何が言えるか考察してい	10		
			ā.	10		
	(5)	吸着現象を説明する吸着等温式モデルは,ラングミュアやフロイントリッヒだけに限らない.そ	吸着等温式モデルについて調査し,各モデルの関係や適用限界について説明されている.			
		の他どのような吸着等温式モデルがあるか調査せよ.各モデルの関係や適用限界について説明せ		10		
		<u>د.</u>				
4	. ,	結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
6	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

合計点: 0 評価: 不合

実態	Ŕ	チェック項目	評価	判定
7	(1)	ファイル名が正しく記載されている。 (半角英数字で,テーマ番号 _ 学籍番号 _ 氏名.docx)		
	(2)	鋳型ファイルを用いている。		拉上不可能
,	(3)	鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		沐黑个可能
	(4)	❶背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・ ④ 結論・ ⑤ 参考文献 が全て記載されている。		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	非星 月京	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
L	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している。	2		
a	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している.	2		0
•			(規格グレードやファクター等,試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)			
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		
			精秤したベンゼンの量を適切な桁数で記載している.	5		
	(1)	振動励起を伴わない $S_0 { ightarrow} S_1$ 電子遷移が,禁制遷移であることを (7.5) 式に基づき確認せよ.	S_0 および S_1 状態の電子配置を正しく図示している.	5		
			S_0 および S_1 状態の項記号を,計算過程を示しつつ正しく求めている.	5		
			遷移モーメントが三次元ベクトルであることに注意して、振動励起を伴わない $S_0 \rightarrow S_1$ 電子遷移	5		
			の場合について, (7.5) 式を正しく立式している.	Ŭ		1
			上式を変形し、振動励起を伴わない $S_0 \to S_1$ 電子遷移が禁制遷移であることを、正しく説明して	5		
			いる。	,		
	(2)	図 7.1 から,振動励起を伴う S0→S1 電子遷移が許容となるための振動モードを特定せよ.	基底状態の振動状態は,一般にポルツマン分布的にごく僅かにしか励起されていないことに注意	5		
			して、振動基底状態の項記号を正しく説明している.	,		
			遷移モーメントが三次元ベクトルであることに注意して、振動励起を伴う $S_0 \to S_1$ 電子遷移の場	5		
			合について, (7.8) 式を正しく立式している.	,		
			上式を変形し、振動励起を伴う $S_0 o S_1$ 電子遷移が許容遷移となるための、振動励起状態の項記	5		
			号の候補を正しく説明している.	3		
6			「(A) 電子基底状態の振動基底状態から、電子励起状態の上で求めた候補既約表現に属する振動励			0
			起状態への遷移」と、「(B) 電子基底状態の上で求めた候補既約表現に属する振動励起状態から、	5		
			電子励起状態の振動基底状態への遷移」の起こりやすさ、すなわち、スペクトル強度を、ボルツ			
			マン分布の観点から正しく説明している.			1
			0-0 遷移が禁制遷移であることに注意して、遷移 (A) および (B) に対応するピークを正しく帰属	5		
			している.	ŭ		
			帰属したピークの波数の差は、上で求めた振動励起状態の候補既約表現に属する振動モードの2			
			量子分に相当することに注意して、1量子分の振動モード、すなわち振動数の目安がどの程度に	5		
			なるか, 正しく求めている.			4
			上で求めた目安振動数に相当するモードを図 7.1 から探し出し、振動励起を伴う $S_0 \rightarrow S_1$ 電子遷	5		
			移が許容遷移となるための,振動励起状態の項記号を正しく特定している.			
		系統的に連なった振動ピーク(振動プログレッション)が観測される場合、遷移モーメントの考				
		察から、その振動モードは全対称表現に属する。この事実と(1),(2)を用いてベンゼンの電子ス	· ·	10		
		ペクトルに観測された振電ピークの帰属を行え。	ドが存在するか,正しく考察している.			4
			図 7.1 から,対応する振動モードを正しく特定している.	10		
Ě		結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
9	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

 合計点:
 0

 評価:
 不合材

実験		チェック項目	評価	判定
	(1)	ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
0	(2)	鋳型ファイルを用いている。		拉上不可能
0	(3)	鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		休息个可能
	(4)	●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・❸参考文献 が全て記載されている。		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
u	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	操作	実験テキスト 8.2 理論の内容を参考に、本実験の理論をまとめている。	2		
	(1)	ブタジエンおよびシクロブタジエンの Hückel 計算を行い,それぞれの分子軌道エネルギー準位図	(8.10) 式に示す永年方程式を,ブタジエンの場合について正しく立式している.	5		
		をまとめよ.	Hückel近似を適用しつつブタジエンの永年方程式を変形し、分子軌道のエネルギー準位を正しく 求めている。	5		
			分子軌道は規格化されていることに留意し,ブタジエンの各分子軌道について,計算過程を示しつつ分子軌道係数の組を正しく求めている.	5		
			ブタジエンの分子軌道エネルギー準位図を,分子軌道係数の符号と大きさを反映させて描いている.	5		
			(8.10) 式に示す永年方程式を、シクロブタジエンの場合について正しく立式している.	5		
			Hückel近似を適用しつつシクロブタジエンの永年方程式を変形し、分子軌道のエネルギー準位を正しく求めている.	5		
			分子軌道は規格化されていることに留意し、シクロブタジエンの各分子軌道について、計算過程 を示しつつ分子軌道係数の組を正しく求めている。	5		
			シクロブタジエンの分子軌道エネルギー準位図を,分子軌道係数の符号と大きさを反映させて描いている.	5		
0	(2)	上の結果から、ブタジエンおよびシクロブタジエンの全エネルギーを求めよ. これらの分子はエチレン分子が二つ繋がったものである. エチレン二分子の全エネルギーとの比較検討から、それ	計算過程を示しつつ, ブタジエン, シクロブタジエン, エチレンの全エネルギーを正しく求めている.	5		0
		ぞれの分子の安定性について考察せよ. (計算で分子の安定性を評価できることが理解できる。)	Hückel 計算の範囲内で得られる分子の安定性について正しく考察している.	5		
	(3)	共役ジエンとアルケン(ジエノフィル)を混合すると反応を生じ,シクロヘキセン誘導体を与え る(Diels-Alder 反応:図8.2参照).化学反応は反応分子のFrontier 軌道が互いに上手く重なると	ブタジエン, エチレンのエネルギー準位図より, 分子間で生じる電子の授受について正しく説明 している.	5		
		きよく生じる(Frontier 軌道論). Diels-Alder 反応が起こる理由を Hückel 計算の結果に基づき量子化学的に説明せよ. (軌道の位相,大きさに留意せよ.)共役ジエン・アルケンの組み合わせとしてプタジエン・エチレンを用いよ.	分子軌道係数の大きさと符号に着目し,Diels-Alder 反応の生じる方向性について正しく説明している.	5		
	(4)	ベンゼンのHückel 計算を行い,それぞれの分子軌道エネルギー準位図をまとめよ.	(8.10) 式に示す永年方程式を,ベンゼンの場合について正しく立式している.	5		
			Hückel近似を適用しつつベンゼンの永年方程式を変形し,分子軌道のエネルギー準位を正しく求めている.	7		
			分子軌道は規格化されていることに留意し,ベンゼンの各分子軌道について,計算過程を示しつ つ分子軌道係数の組を正しく求めている.	7		
			ベンゼンの分子軌道エネルギー準位図を、分子軌道係数の符号と大きさを反映させて描いている.	5		
4	(1)	結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
9	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

実験		チェック項目	評価	判定
	(1)	ファイル名が正しく記載されている。(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2)	鋳型ファイルを用いている。		
9	(3)	鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4)	●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・●参考文献が全て記載されている。		
	(5)	参考文献に、Web媒体を使用していない.		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
•	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している.	2		
a	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している.	2		0
9			(規格グレードやファクター等,試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)			U
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している。	2		
	(1)	軸:赤外光波数[cm-1]). このスペクトル形状は、分光光度計内部の赤外光源の強度に、光路中の気がスカリッ変板による光線の心臓(による光線)の大阪内を入れ、中のストストリップが下向きのピーク	適切なグラフが作成されている。	2		
		の スパットルーのエル () いっぱい でいる。 スペットルーのエル () いっぱい でいる。 スペットルーのエル () でいる。 スペットルーの でいる。 スペットルーの 吸収に起因すると考えられるかを記せ、	主な下向きのビーク群について,その由来を適切に考察できている。	3		
	(2)	HCI の吸光度が最大となる赤外光波数とそこでの吸光度を読みとり、それらの値を赤外光の波長	最大吸光度とそこでの波数が適切に読み取れている.	2		
		[μm], 透過率[%], 光強度に変換せよ.	計算過程を示しつつ, 波長への換算が正しく行えている.	2		
			計算過程を示しつつ,透過率への換算が正しく行えている.	2		
			計算過程を示しつつ,光強度への換算が正しく行えている.	2		
	(3)	HCI の赤外吸収スペクトルを $3200\sim2500~{ m cm}^{-1}$ の範囲で図示し,主要な振動回転遷移バンドの	適切なグラフが作成されている。	2		
		ピーク波数を −10 ≦ m ≦ +10 の範囲で読み取って表にまとめよ.これを m についての二次関数	HCIの振動回転スペクトルから,-10≦m≦+10の波数を読み取り,適切な桁数でまとめている.	4		
		a + bm + cm² で最小二乗フィッティングして,パラメータ a, b, c を決定せよ.	上記の結果を用いて, m (-10≦m≦+10) に対する波数をプロットできている.	4		
			作成したプロットを最小二乗フィッティングし、得られた各係数を、有効桁も含めて正しく記載できている.	4		
	(4)	上のパラメータを(9.11)式と比較し、基本振動数 $\nu_{\rm e}$ と回転定数 ${\sf B}_0$, ${\sf B}_1$ を求めよ[単位:cm $^-$	計算過程を示しつつ,基本振動数 $\nu_{\rm e}$ を有効桁を含めて正しく求められている.	4		
		1].	計算過程を示しつつ, v=0 での回転定数 B ₀ を有効桁を含めて正しく求められている.	4		
0			計算過程を示しつつ、v=1 での回転定数 B ₁ を有効桁を含めて正しく求められている.	4		0
		ν _a と ¹ H ³⁵ Cl の換算質量 μ から力の定数 K [mdyn/Å] を計算せよ.	計算過程を示しつつ、力の定数を有効桁・単位を含めて正しく求められている.	5		
		B ₀ , B ₁ から α。と B。を計算し、B ₀ , B ₁ , B ₁ の大小関係がなぜ生じるかを考察せよ。	計算過程を示しつつ, α。を有効桁を含めて正しく求められている.	3		
			計算過程を示しつつ,B _e を有効桁を含めて正しく求められている.	3		
			回転定数の大小関係を核間距離の大小関係と関連付けて説明することができている。	3		
			「アトキンス 物理化学要論 第7版」トピック11Cを参考に、平衡核間距離と v=0,1 での平均核間 距離の相違について、分子振動の観点から考察できている。	5		
		さらに、B _e と(9.5)式から HCI の平衡核間距離 R _e を求めよ.	計算過程を示しつつ,回転定数から平衡核間距離を有効桁・単位を含めて正しく求めている.	4		
	(5)	1 H 35 CI の力の定数 K,平衡核間距離 R $_{e}$ が 1 H 37 CI でも同じであると仮定し,また α_{e} も同じ値であ	¹ H ³⁷ CI の振動回転遷移の波数を m の関数として表すことができている.	4		
		ると仮定して、 1 H 3 CI の振動回転遷移の波数を予測せよ。実測のスペクトルから 1 H 3 CI のパンドのビーク波数を $-5 \le m \le +5$ の範囲で読み取り、この予測値と実測値(読み取り値)を表にま	上記の予測のもと、 1 H 37 CI の振動回転遷移の $-5 \le m \le +5$ の範囲の m に対する波数を、適切な有効桁で表にまとめている。	4		
		とめて比較せよ.	HCI のスペクトルの弱いバンドのビーク位置を読み取り、適切な有効桁で表にまとめている.	4		
	(6)	分子の回転状態の占有数はその状態の縮退とボルツマン分布で決まる. 「アトキンス物理化学要 論 第7版」pp.451-452を参考に,HCI において室温での占有数が最大となる回転状態のJ _{Max} を求	「アトキンス物理化学要論第7版」pp.451-452を参考に、実験時の室温での HCI の占有数最大となる回転状態を求めることができている。	3		
		めよ、実測のスペクトルにおける吸光度最大のパンドは、始状態をリーJ _{Max} とする遷移であるか調べよ.	HCI の実測のスペクトルの吸光度最大となるパンドは、どの回転状態Jからの遷移であるかを答えられている。	3		
Ø	(1)	結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
9	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

実験	チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている.		
10	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・●参考文献 が全て記載されている.		
	(5) 指定の gjf/log ファイルを提出している.		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
a	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
U	(2)	目的	本実験の目的を、自分の言葉で説明している。	3		U
a	(1)	ソフトウエア	本実験で使用したソフトウエアをバージョンも含めて全て記載している.	2		0
•	(2)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		U
	(1)	$ m H_2$ と $ m H_2^+$ の構造最適化を $ m HF$ レベルで行い,平衡核間距離を比較せよ.基底関数には最小基底系	$HF/STO\text{-3G}$ レベルの量子化学計算で算出した H_2 と H_2^+ の平衡核間距離を,有効桁を含めて正し	6		
		の STO-3G を適用すること(HF/STO-3G のように表記する).最小基底系とは何か説明せよ.	く記載し、比較している.	O		
		H ₂ について,平衡核間距離における分子軌道エネルギーダイヤグラムを定量的に描き,イオン化	最小基底系とは何か,説明している.	6		
		が分子構造に与える影響を結合次数の概念を用いて説明せよ.	H ₂ について,平衡核間距離における分子軌道エネルギーダイヤグラムを定量的に描いている.	6		
			イオン化が分子構造に与える影響を結合次数の概念を用いて説明している。	6		
	(2)	HCI について,HF, MP2, MP3, CCD, CCSD レベルの量子化学計算を実施し「平衡核間距離・固有	指定レベルの量子化学計算で算出した HCI の平衡核間距離を,有効桁を含めて正しく記載してい	6		
		振動数・双極子モーメント」を算出せよ。基底関数には原子価二倍基底系の cc-pVDZ を適用する	3 .	Ü		
		こと(CCSD/cc-pVDZ 等のように表記する). 表 10.1, 10.2 の網掛け部分を埋めよ.	指定レベルの量子化学計算で算出した HCI の固有振動数を,有効桁を含めて正しく記載してい	6		
8			3.	ŭ		0
			指定レベルの量子化学計算で算出した HCI の双極子モーメントを,有効桁・分子座標を考慮した	10		
			符号も含めて正しく記載している.	10		ĺ
	1	,, ,, , , , , , , , , , , , ,	表 10.1 を,有効桁を含めて正しく埋めている.	6		
			表 10.2 を,有効桁・分子座標を考慮した符号も含めて正しく埋めている.	10		
		表 10.1, 10.2 を用い,予習課題で調査済みの実験値と (2),(3) の計算結果を比較せよ. ab initio 計	,	10		
		算における電子相関の取り扱いレベルおよび基底関数レベルの違いにより量子化学理論的予測精	よび基底関数レベルの違いにより量子化学理論的予測精度はどう変化するか考察している.			
		度はどう変化するか.	表 10.2 について,計算値と実験値を比較し, <i>ab initio</i> 計算における電子相関の取り扱いレベルお	10		
			よび基底関数レベルの違いにより量子化学理論的予測精度はどう変化するか考察している.	_0		
4			本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
•	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

実験	き チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている。(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている。		
11	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・❺参考文献 が全て記載されている。		
	(5) 参考文献に、Web 媒体を使用していない.		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
U	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
	(1)	器具	本実験で使用した器具を全て記載している.	2		
0	(2)	試薬	本実験で使用した試薬を全て記載している.	2		0
•			(規格グレードやファクター等,試薬ラベルから読み取った情報も記載すること.)			U
	(3)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		
	(1)	各溶液の実測データから吸収極大波長(単位:nm),波数(単位:cm ⁻¹),励起エネルギー(単	全ての試料溶液について有効桁を含めて正しく表 11.1 を埋めている.	5		
		位:eV)モル吸光係数(単位:cm-¹dm³mol-¹)を算出せよ..	計算過程を示しつつ,全ての試料溶液について,モル濃度を有効桁を含めて正しく計算してい	5		
			3 .	J		
			測定した紫外・可視吸収スペクトルについて,適切なグラフが作成されている.	5		
			全ての試料溶液について,吸収極大波長およびその時の吸光度が正しく読み取られている.	5		
			計算過程を示しつつ,全ての試料溶液について,波数を有効桁を含めて正しく計算している.	5		
			計算過程を示しつつ,全ての試料溶液について,励起エネルギーを有効桁を含めて正しく計算し	5		
			ている.	Ŭ		
			計算過程を示しつつ,全ての試料溶液について,モル吸光係数を有効桁を含めて正しく計算して	5		
6			va.			0
			アトキンス物理化学要論 トピック11 表11D.1, 図11D.1 を参考に,各溶液中で色素が吸収した光	7		_
			の色について,正しく説明している.	<u> </u>		
			アトキンス物理化学要論 トピック11 を参考に,色が見える二つの仕組み(物体そのものの発光に			
			よるもの、物体が光を吸収するもの)について、具体例を挙げながらそれらの原理について正し	8		
	(-)		く説明している。			_
		メタノール・エタノール・アセトンの比誘電率は,それぞれ, $\epsilon_{ m MeOH}$ =32.613, $\epsilon_{ m EtOH}$ =24.852, ϵ		10		_
		AC	Reichardt's 色素の基底状態と励起状態の電子構造・双極子モーメント(図11.2 参照)について、	10		
			正しく説明している。			4
			各状態において溶媒が溶質に与える分子間相互作用について考慮し、Reichardt's 色素のソルバト	10		
	(a)		クロミズムについて正しく説明している。	_		
4	(1)		本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
•	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

 合計点:
 0

 評価:
 不合格

実験	チェック項目	評価	判定
	(1) ファイル名が正しく記載されている.(半角英数字で,テーマ番号_学籍番号_氏名.docx)		
	(2) 鋳型ファイルを用いている.		
12	(3) 鋳型ファイル内の色付き文章が全て削除されている。		採点不可能
	(4) ●背景/実験目的・❷方法・❸結果と考察(課題)・●結論・⑤参考文献 が全て記載されている.		
	(5) 指定の gjf/log ファイルを提出している.		

項目	問	課題	採点項目	配点	得点	合計
0	(1)	背景	本実験のモチベーションとなる背景を,自分の言葉で説明している.	3		0
Ð	(2)	目的	本実験の目的を,自分の言葉で説明している.	3		U
2	(1)	ソフトウエア	本実験で使用したソフトウエアをバージョンも含めて全て記載している.	2		0
•	(2)	操作	本実験で行なった操作を過去形で記述している.	2		U
			気相中(モデル ③)の電子遷移について,強い強度をもつ電子遷移を確認し,その励起エネル ギー・波長・振動子強度を有効桁を含めて正しく記載している.	5		
	` ′		(1-1) で着目した遷移で、「どの占有軌道からどの空軌道」に電子が励起されたのかを確認し、図 1に正しく描き写している。	5		
	(1 2)	基底(Sn)状態および第一励起(Sn)状態における双極子モーメントを抜き出し,表 12.2を完成	それらの軌道エネルギーを、有効桁を含めて図1の括弧内に正しく記載している。	5		
	(1-3)		双極子モーメントの変化を、(1-2)で得た軌道の概形から正しく説明している。	5		ł
	(1-4)		表12.1 を、有効桁を含めて正しく埋めている	5		
	(1-5)		計算過程を示しつつ、実験データ例から吸収光のエネルギーを計算し、表12.1 に、有効桁を含めて正しく記載している。	5		•
0			実測と計算値(モデル3)を比較し,モデルの化学精度について正しく説明している.	5		0
			実測と計算値(モデル❶)を比較し,モデルの化学精度について正しく説明している.	5		
			実測と計算値(モデル❷)を比較し,モデルの化学精度について正しく説明している.	5		
			実測と計算値(モデル ①~③)の比較から,ソルバトクロミズム を精度よく計算するにはどのようなモデルを組み立てるべきか,考察している.	10		
		(1-2) で扱ったモデル ❸ に対応する「モデル ❹・❷ の軌道エネルギー」を解析せよ.溶媒効果を定量評価することで,ソルバトクロミズム機構を説明せよ.	各溶媒中におけるモデル ① の基底状態・励起状態の軌道エネルギーを有効桁を含めて正しく記載している。	6		
			各溶媒中におけるモデル❷の基底状態・励起状態の軌道エネルギーを有効桁を含めて正しく記載 している.	6		
			溶媒効果を定量評価し,ソルバトクロミズム機構を正しく説明している.	10		
4	(1)	結論	本実験で得られた結論を,自分の言葉で説明している.	6		0
9	(1)	参考文献	著者名・「文献タイトル」出版年・参照ページなどの情報を鋳型にしたがって記載している.	2		0

合計点: 0 平点 不会 数