

科目コード 8025080	授業科目名 和名：材料工学演習 英文：Materials Engineering Exercise		学期 前期	曜日 月曜	時限 5,6	単位 2	条件 必修	対象学生 材料工学 2年次
	授業の形式と時間数 実習 60時間							
担当教官名 菅原 茂夫 石尾 俊二 小玉 展宏	所属 材料工学 材料工学 材料工学	学内室番号・電話番号 工資3-313・889-2404 工資3-310・889-2405 教文3-204・889-2650	担当教員名 材料工学 オフィスアワー	所属 材料工学	学内室番号・電話番号 工資3-316・889-2412	時間：随時 場所：各指導教官室		
<b>授業の目的・概要及び達成目標</b> 1. 目的・概要 材料学の分野で良く使われる計算・演算技術を身につけるために、以下の内容に関する演習を行う。 (1) 結晶の構造解析を行う際に必要な計算法の基礎を理解する。 (2) フーリエ解析および微分方程式の基礎を理解する。 (3) 行列・行列式の基礎とそれらの分子軌道法への応用を理解する。 2. 達成目標 (1) 格子面と格子方向を正しく表し、面間隔および面角、単位体積中の原子数が計算できる。 (2) 任意の周期関数や単一の矩形波パルスについてフーリエ変換ができる。 (3) 基礎的な行列・行列式の計算ができる。 (4) 分子軌道法によるエネルギー固有値と波動関数の基本的な求め方が理解できる。 (5) 基礎的な微分方程式を解くことができる。								
<b>カリキュラム上の位置づけ</b> 結晶学の内容に関しては材料物理学Ⅰと固体構造化学に関連している。いずれも材料学において多用される計算・演算法を扱っており、2年以降に学ぶ専門科目の理解に役立つ。								
<b>授業の進行予定と授業の進め方</b> 担当：菅原茂夫 1. 格子面および格子方向のミラー指数表示 2. 単位格子における原子の充填率、原子数の計算 3. 格子面間隔、面角、晶帯軸の計算 4. X線回折による回折角および格子定数の計算 5. fccおよびbcc結晶における消滅則の検討 6. JCPDSデータカードの利用法 担当：石尾俊二 7. フーリエ解析の概要、三角関数、オイラーの公式 8. 三角関数の復習と三角関数の合成 9. 周期2の関数 10. 任意の周期を持つ関数のフーリエ変換 11. 無限周期関数、矩形波単一パルスのフーリエ変換 12. 物理への応用（単振動の運動の共振現象）、複素形式 担当：小玉展宏 13. 行列の基礎（1）転置行列、対称行列、小行列の分割 14. 行列と基礎（2）逆行列、同次連立1次方程式 15. 行列式の基礎（1）行列式の計算、余因子行列、正規直交化 16. 行列式の基礎（2）固有方程式の解法、行列の対角化 17. 分子軌道法への応用（1）分子軌道法の基礎、Huckel近似 18. 分子軌道法への応用（2）分子等における永年行列方程式解法、軌道エネルギーと波動関数表現 担当：田上道弘 19. 変数分離微分方程式 20. 同次形微分方程式 21. 完全微分形微分方程式 22. 積分因数 23. 1階線形微分方程式 24. 線形微分方程式								
授業に関連する キーワード	結晶構造 行列式	X線回折 分子軌道法	フーリエ変換 微分方程式	行列				
<b>成績評価の方法</b> 各達成目標について4回の試験を行い、5つの達成目標の各項目で50%以上の評価を得たものを合格とする。								
<b>教科書・参考書等</b> 参考書：カリティX線回折要覧（松村源太郎 訳，アグネ），化学者のための数学十講（大岩正芳 著，化学同人）								