

科 目		必・選	担 当 教 員		学年・学科		単位数	授 業 形 態						
物理化学 (Physical Chemistry)		必	西本 真琴 林 純二郎		4 年生 物質工学科		2	通年 週 2 時間						
授業概要		3 年生での学習内容を基礎にして、溶液の熱力学的性質、化学反応速度、および量子化学の基礎を学習する。												
到達目標		化学における基礎知識として、溶液諸性質の熱力学、化学反応速度論の考え方、および量子化学の基本的事項を理解し、これらに関する基本的計算を行うことができる。また、その知識を応用することができる。(C)												
評価方法		定期試験70%，課題点(小テストおよびレポートの平均)30%で評価し、60点以上を合格とする。												
教科書等		教科書：W. J. ムーア著、細矢・湯田坂訳、ムーア基礎物理化学(上)および(下)、東京化学同人 参考書：G. バロー著、藤代訳、バロー物理化学(上)および(下)、東京化学同人 A. W. フォックス著、千原訳、フォックス物理化学(上)および(下)、東京化学同人 初等量子化学 第2版 大岩正芳(化学同人)、量子化学 真船文隆(化学同人)												
内 容									学習・教育目標					
第 1 週	ガイダンス、熱力学の復習、熱力学関数関係、溶液の組成								C					
第 2 週	部分モル体積								C					
第 3 週	化学ポテンシャルと蒸気圧								C					
第 4 週	ラウールおよびヘンリーの法則								C					
第 5 週	気液平衡関係								C					
第 6 週	束一的性質								C					
第 7 週	化学反応速度の定義と表現								C					
第 8 週	反応速度の求め方	(中間試験)							C					
第 9 週	1次反応速度式								C					
第 1 0 週	2次反応速度式								C					
第 1 1 週	反応速度の温度依存性								C					
第 1 2 週	触媒作用(1)								C					
第 1 3 週	触媒作用(2)								C					
第 1 4 週	遷移状態理論								C					
第 1 5 週	反応速度と熱力学関係	(期末試験)							C					
第 1 6 週	粒子の波動性と光の性質								C					
第 1 7 週	分子エネルギーと量子状態(1)								C					
第 1 8 週	分子エネルギーと量子状態(2)								C					
第 1 9 週	シュレーディンガー方程式と波動関数								C					
第 2 0 週	1 次元並進運動(1)								C					
第 2 1 週	1 次元並進運動(2)								C					
第 2 2 週	1 次元並進運動(3)								C					
第 2 3 週	原子スペクトル	(中間試験)							C					
第 2 4 週	Bohrモデル								C					
第 2 5 週	水素原子(1)								C					
第 2 6 週	水素原子(2)								C					
第 2 7 週	水素原子(3)								C					
第 2 8 週	分子軌道と化学結合								C					
第 2 9 週	LCAO-MO法、ヒュッケル分子軌道計算(1)								C					
第 3 0 週	ヒュッケル分子軌道計算(2)、まとめ	(期末試験)							C					
(特記事項)			JABEE との 関 連											
課題演習および小テストは授業中に 随時実施する。電卓およびレポート用 紙は毎回必ず持参すること。			JABEE		a	b	c	d1	d2a) d)	d2b) c)	e	f	g	h
			本校の学習		A	B	C-1	C-1	C-2	B	B	D	C-3	B
			・教育目標				◎							

1. 合格ラインについて、特に記載の無いものは、60点以上を合格とします。

2. 定期試験について、特に記載の無いものは、評価配分を均等とします。(【例】年4回定期試験を実施した場合の各定期試験の評価配分は、特に記載の無いものは、25%ずつになります。)

### 1) 概要

前半は、溶液の性質および化学反応速度を学習する。溶液論では、溶液の諸性質を熱力学的立場から学習する。反応速度論では、反応が進行する速さについての定量的取扱いを学習し、速度論的に見た化学反応の特色を学ぶ。

後半は、量子論の基礎として、分子エネルギー、光の性質、波動関数、および分子軌道計算を学習し、数学的取扱いにも慣れる。

### 2) 主な学習内容と注意点 (学習事項)

#### ①溶液の性質(第1～6週)

溶液の組成から出発し、巨視的な溶液性質を、熱力学的取扱いによって学ぶ。溶液の正確な体積を求めるためには、部分モル体積という考え方が必要である。また、化学反応を理解する上で重要な化学ポテンシャルについて、反応平衡および気液平衡関係との関連に注意して学ぶ。

さらに、相平衡関係の基礎として、理想溶液の意味と蒸気圧の計算方法等を学習し、溶液の蒸気圧(気液平衡関係)や沸点等の計算が正しく出来るようになる。

(部分モル体積、化学ポテンシャル、蒸気圧とその計算、Raoultの法則、Henryの法則、濃度計算、束一的性質)

#### ②化学反応速度論(第7～15週)

化学反応進行を理解し予測する上では、熱力学的取扱い(平衡論)に加えて、反応が進む速さに着目した取扱い(速度論)が必要である。ここでは、反応速度の意味とその理論について学習する。

反応速度の定義を正しく理解し、典型的な反応について、温度変化を含めた定量的計算法が正しく行えるようになる。また、触媒のはたらきと、反応進行に及ぼす影響について学ぶ。さらに、遷移状態理論の基本的な考え方について学習する。

(反応進行度、反応次数、微分法と積分法、アレニウス式、活性化エネルギー、遷移状態、熱力学関数)

#### ③分子エネルギーとシュレディンガー式(第16～27週)

原子や分子の波動性の基礎を、物質波等の項目を通して学習し、量子力学の特色を古典力学と対比させて学ぶ。結論としてのエネルギー量子化と量子数の意味をおさえた上で、並進、回転、振動運動のエネルギーについて学習する。また、電磁波の基礎的性質について、化学における応用と関連づけて学習する。

シュレディンガー式については、まず1次元並進運動について基礎的事項を学ぶ。次に、水素原子中の電子の取り扱いを学ぶ。結果の関係式を正しく理解して、実用的結果を出すための計算ができるようになることが大切である。話の筋道を見失わないように注意しながら勉強してほしい。ここでは、古典的ボーアモデルから出発し、量子数および数学的演算子の取り扱いも含めた波動関数の取り扱いをやや詳しく学ぶ。

(分子のエネルギー、電磁波、波動関数、存在確率、エネルギー、原子スペクトル、ボーア理論、量子数、動径分布、軌道、電子配置)

#### ④分子軌道法の基礎(第28週～30週)

分子の化学結合を理解するため、ヒュッケル分子軌道法の計算について学ぶ。ここでは、簡単な行列式が出てくるので、行列式の展開計算等を復習しておくこと。原子軌道の波動関数を用いて、分子軌道を近似的に表す場合の原理(変分原理)とその具体的計算方法を学習する。LCAO法と呼ばれる近似法と、求められる波動関数の意味を正しく学びとること。

(分子軌道、LCAO-MO、ヒュッケル近似、永年行列式、結合エネルギー)