

科 目		必・選	担 当 教 員	学年・学科			単位数	授 業 形 態					
化学反応論 (Chemical Reaction Theory)		選	河地 貴利	2 年生 エコシステム工学専攻			学修単位 2	半期 週 2 時間					
授業概要		物質の化学変化の速度やそのメカニズムに関する理論を学び、演習を通じて理解を深める。											
到達目標		1) 反応速度の定義および化学反応の基礎理論を説明できる。(C-2, C-3) 2) 有機反応に関与する各種効果を説明できる。(C-2, C-3)											
評価方法		試験 50%, 演習課題 50%で評価し、60点以上を合格とする。											
教科書等		教科書： 慶伊富長 著, 反応速度論, 東京化学同人 参考書： 奥山 格 著, 有機反応論, 朝倉書店 土屋荘次 著, はじめての化学反応論, 岩波書店											
内 容		(110分授業を15回実施する。なお、1回の自宅演習は240分を目処にする。)							学習・教育目標				
第 1 回	概説,	化学反応論の基礎					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 2 回	化学反応の理論	化学反応の速度					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 3 回		素反応と複合反応					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 4 回		分子の衝突と化学反応					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 5 回		遷移状態理論					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 6 回	反応の解析	溶液反応					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 7 回		触媒反応					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 8 回		光化学反応					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 9 回	有機反応論	有機反応機構の研究					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 10 回		酸/塩基と求核種					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 11 回		溶媒効果					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 12 回		同位体効果					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 13 回		置換基効果					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 14 回		分子軌道法					(自宅演習)	C-2, C-3					
第 15 回	試験						(自宅演習)	C-2, C-3					
(特記事項) 90分授業の場合は、上記内容を15週間に18回の授業で行う。			JABEEとの関連										
			JABEE	a	b	c	d1	d2a) d)	d2b) c)	e	f	g	h
			本校の学習・教育目標	A	A	C-1	C-1	C-2	B	B	D	C-3	B
								◎				◎	

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。

## 2E 化学反応論

化学反応とは分子が相互作用して別の分子へ変化する現象である。化学反応論は化学反応の速度やメカニズムを扱い、化学反応の本質を明らかにすることを目的としており、化学反応の速さを反応物と生成物の濃度変化として追跡する「反応速度論」と化学反応を原子分子の衝突による化学結合の組み換えとして捉える「反応ダイナミクス(動力学)」によって構成されている。本科目では、これら反応速度論と反応ダイナミクスを理解したのち、その応用として有機反応論の基本原則を学習する。

- ◆ 第1回: 本科目の学習内容と授業の進め方を説明する。化学反応論の対象と方法を解説する。

【key words: 化学種, ミクロとマクロ, 活性化エネルギー, 遷移状態, エネルギー変化】

- ◆ 第2～5回: 化学反応に関する基礎理論を理解する。

第 2回: 反応速度の定義, 反応速度定数の温度依存性, および反応速度の測定法を学習する。

第 3回: 単分子反応と2分子反応を例に素反応の機構を学ぶ。また、逐次反応, 並列反応, および可逆反応を例として複合反応を学習する。

第 4回: 気体分子の運動を理解し、分子衝突の頻度と化学反応進行の相関を学習する。

第 5回: ポテンシャルエネルギー曲面を用いて反応経路を考え、活性化パラメータの求め方を学習する。

【key words: 反応速度, 一次反応, 半減期, 素反応, 逐次反応, 並列反応, 可逆反応, 反応次数, 二次反応, 平衡状態, 気体分子運動論, 衝突頻度, 発熱・吸熱反応, アレニウス式, 速度定数, 反応経路, ポテンシャルエネルギー曲面, 活性化パラメータ, 同位体効果】

- ◆ 第6～8回: 実際の化学反応の解析方法を理解する。

第 6回: 溶液中での拡散律速反応, および溶媒の物性や溶媒和が反応に及ぼす影響を学習する。

第 7回: 触媒と活性化エネルギーの関係, 自触媒反応, 酵素反応の機構を学習する。

第 8回: 光エネルギーによる分子の励起と光化学反応の実例について学習する。

【key words: 拡散律速, 溶媒和, 自触媒反応, 酵素, ミカエリス-メンテン機構, 量子収率, 励起分子の失活, 光解離反応】

- ◆ 第9～14回: 有機反応の基本的な反応機構とそれに影響を及ぼす各種の効果について理解する。

第 9回: 有機反応機構の研究手法, 反応機構の表現方法, 反応中間体, 交差実験等を学習する。

第 10回: 有機反応に関与する酸/塩基, 求核/求電子試薬, カルボカチオン/カルボアニオンの性質を学習する。

第 11回: 溶媒の物性(プロトン性/非プロトン性, 極性/非極性など)や溶液の構造が及ぼす効果を学習する。

第 12回: 同位体が反応速度や平衡定数に及ぼす効果を学習する。

第 13回: 置換基が有機反応に与える効果を直線自由エネルギー関係に基づいて学習する。

第 14回: 分子間相互作用およびフロンティア分子軌道の概念を学習する。

【key words: 極性反応, ラジカル反応, 反応中間体, 同位体標識, 交差実験, 立体化学, プレンステッド酸・塩基, ルイス酸・塩基, 求核種, 求電子種, 一次・二次同位体効果, 直線自由エネルギー関係, 分子間相互作用, フロンティア分子軌道, ペリ環状反応】

- ◆ 第15回: 試験

理解度を確認するための筆記試験を行う。