

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. ムア著、細矢・湯田坂訳、ムア基礎物理化学(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. アトキンス著、千原訳、アトキンス物理化学(上)および(下)、東京化学同人 大岩正芳著、初等量子化学-その計算と理論、化学同人 佐藤、細矢 著、ムア基礎物理化学問題の解き方 東京化学同人											
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	古典的波動方程式とシュレーディンガー方程式								C				
第 2 0 週	並進エネルギーと量子化								C				
第 2 1 週	並進の波動関数 (1)								C				
第 2 2 週	並進の波動関数 (2)								C				
第 2 3 週	原子スペクトルとボーアのモデル (中間試験)								C				
第 2 4 週	水素原子のシュレーディンガー方程式 (1)								C				
第 2 5 週	水素原子のシュレーディンガー方程式 (2)								C				
第 2 6 週	水素原子のシュレーディンガー方程式 (3)								C				
第 2 7 週	原子価の理論								C				
第 2 8 週	水素分子(H <sub>2</sub> <sup>+</sup> )の化学結合 (1)								C				
第 2 9 週	水素分子(H <sub>2</sub> <sup>+</sup> )の化学結合 (2)								C				
第 3 0 週	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	A	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%ずつとなります。)

## 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、量子化学の基礎を学習する。化学で取り扱う物質は、原子、分子、電子のように小さな粒子であり、量子力学の法則に従うこれらの小さな粒子の持つ性質を理解することは重要である。ここでは、まず、電子の波としての性質を記したシュレーディンガーの方程式を学び、分子中の電子が持つ量子化されたエネルギーの取り扱いの基礎を学習し、原子構造やそのスペクトル、化学結合などについての量子化学的な取り扱いを学ぶ。

## 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分子の持つエネルギーとシュレーディンガー方程式(第16～23週) (第4章、第20章、第21章)

まず、波動性と粒子性という二重性を持つ光や電子などの小さな粒子に成り立つ性質として、エネルギーの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。次いで、原子や分子の持つ電子の波としての取り扱いを、古典的波動方程式とシュレーディンガー方程式の特色を対比させて学ぶ。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。二階微分方程式、行列式などが出てくるので、これらの基礎的な数学の項目についてはきちんと復習しておくこと。

(エネルギーの量子化、ドブロイ波長、シュレーディンガー波動方程式、原子スペクトル、ボーアモデル、量子数)

### ④分子軌道法の基礎(第24週～30週) (第21章、第22章)

分子の化学結合を理解するため、原子化結合法の基礎について $\text{H}_2^+$ を例に学ぶ。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と得られる結果について学習する。

(分子軌道、LCAO-MO近似、変分法、永年行列式、結合エネルギー)

\*物理化学は、式が多数出てくるが、最も大事なことは、そこから出てくる結果がどのような物理的な意味を持っているかを理解することである。各項目で出てくる数式に単に振り回されることなく、一つ一つ丁寧に式の導出を自ら行い、さらに演習問題を丁寧に解いてゆくようにすること。