

| 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 | 1, 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) 基本的な反応の解析ができる。(C-2, C-3) 3) 分子軌道法の基礎を理解している。(C-2, C-3) | | | | | | | | | | |
| 評価方法 | | 試験 50%, 演習課題 50%で評価する。 | | | | | | | | | | |
| 教科書等 | | 教科書: 指定しない 参考書: 土屋荘次「はじめての化学反応論」岩波書店 齋藤勝裕「数学いらずの化学反応論」化学同人 奥山 格「有機反応論」朝倉書店 | | | | | | | | | | |
| 内 容 | | (1回の自宅演習は260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 | 反応速度の定義 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 3 回 | | 1 次反応, 2 次反応 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 4 回 | | 逐次反応, 並列反応, 可逆反応 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 5 回 | | 気体分子運動論 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 6 回 | | 反応エネルギー論 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 7 回 | | 遷移状態理論と活性化パラメータ | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 8 回 | 反応の解析 | 溶液反応 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 9 回 | | 固体表面反応 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 10 回 | | 同位体効果 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 11 回 | | 置換基効果 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 12 回 | 分子軌道法 | 原子軌道 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 13 回 | | 結合と分子構造 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 14 回 | | 分子軌道 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| 第 15 回 | | 化学反応と分子軌道 | | | | (自宅演習) | C-2, C-3 | | | | | |
| (特記事項) | | JABEEとの関連 | | | | | | | | | | |
| | | 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。

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、分子軌道法の基礎を学習する。

◆ 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: 構造・物性・反応, 濃度変化, 活性化エネルギー, 遷移状態, エネルギー変化】

◆ 第2～7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, 1次反応の速度を学習する。

第 3回: 2次反応の速度, オズワルドの分離法を学ぶ。

第 4回: 素反応と総括反応を学ぶ。複合反応として逐次反応・並列反応・可逆反応を学習する。

第 5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 6回: 反応速度の温度依存性, アレニウス式を学習する。

第 7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】

◆ 第8～11回: 実際の化学反応の解析方法を理解する。

第 8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 9回: 固体表面への吸着と固体触媒反応を学習する。

第 10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 11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。

【key words: 溶媒和, 拡散律速, 吸着, 吸着等温式, 固体触媒, 振動エネルギー, 一次・二次同位体効果, Hammett 則, 直線自由エネルギー関係, 立体効果】

◆ 第12～15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 12回: 分子軌道法の基礎となる原子軌道, 電子配置, 混成軌道の概念を学ぶ。

第 13回: 水素原子およびエチレンの分子軌道を学習する。

第 14回: 炭素-ヘテロ原子結合, カルボニル基および共役系分子の分子軌道を学習する。

第 15回: フロンティア軌道の概念を有機反応へ適用する方法を学習する。

【key words: 電子殻, 原子軌道, 縮重, 軌道関数, 電子配置, 共有結合, 混成軌道, メタン, エチレン, アセチレン, 水素, 軌道相関図, 結合距離, 結合エネルギー, プタジエン, フロンティア軌道, HOMO, LUMO, 置換反応, 脱離反応, ペリ環状反応】