

科目	化学反応論 (Chemical Kinetics and Dynamics)		
担当教員	渡辺 昭敬		
対象学年等	応用化学専攻・1年・後期・選択・2単位		
学習・教育目標	工学複合プログラム	A4-3(100%)	JABEE基準1(1) (d)1,(d)2-a,(d)2-d,(g)
授業の概要と方針	化学の基礎となる化学反応論の基礎理論を学ぶ。講義はゼミナール形式を主体とし、問題演習なども積極的に取り入れていく。また、近年の計算機科学の発達に対応するべく量子化学計算によって素反応過程における遷移状態の構造決定演習を行う。		
	到達目標	達成度	到達目標毎の評価方法と基準
1	【A4-3】素反応機構について理解し、反応に応じて反応方程式をたてることができる。		反応次数とその決定法、反応速度式の積分系を求めることができるかどうか定期試験またはレポートで評価する
2	【A4-3】アレニウスの反応速度式について理解する。		アレニウス式の前指数因子の諸理論での解釈について理解しているかどうか定期試験またはレポートで評価する
3	【A4-3】衝突速度理論と遷移状態理論の両者から速度定数を理論的に導出することができる。		衝突速度理論と遷移状態理論の違いを理解しているかどうか定期試験またはレポートで評価する。
4	【A4-3】遷移状態の構造を量子化学計算を用いて予測することができる。		各自が注目した反応系について量子化学計算を行いレポートで提出させる。
5			
6			
7			
8			
9			
10			
総合評価	到達目標1-3の試験またはレポートで70%、目標3のレポートを30%として評価する。ただし、出席状況の悪いものは不合格とする		
テキスト	「化学反応論」 笹野高之 著 (朝倉書店)		
参考書	「分子衝突と化学反応」 R.D.レヴィン、R.B.バーンスタイン著、井上鋒明 訳 (学会出版センター) 「レーザー化学」 土屋荘次 編 (学会出版センター)		
関連科目			
履修上の注意事項	本科 物理化学での熱力学と反応速度論など、応用物理における、量子化学や分光学の知識をもとに講義を展開しているので、関連科目の修得は必須である。		

