

科目		物理化学I (Physical Chemistry I)	
担当教員		渡辺 昭敬 准教授	
対象学年等		応用化学科・4年・通年・必修・2単位 (学修単位III)	
学習・教育目標		A4-C3(100%)	JABEE基準1(1) (d)1,(d)2-a,(d)2-d,(g)
授業の概要と方針		3年生の応用物理で学習した知識を基に、相平衡、化学平衡、電気化学、化学反応速度論、原子構造論を講義し、化学の基礎理論である物理化学全般にわたる基礎知識を理解させる。また、現代化学のことを考えて基本原理からの取り扱いを強調する。	
	到達目標	達成度	到達目標毎の評価方法と基準
1	【A4-C3】化学平衡について熱力学的観点から原理を理解する。またその応用として種々の平衡（相平衡、プロトン移動、塩、溶解度）について理解する		ギブズエネルギーと平衡の関連、ファンツホッフの式および、酸・塩基平衡を理解しているかどうか前期中間試験およびレポートで評価する。
2	【A4-C3】反応速度論について学ぶ。特に、速度論の考え方、反応速度の温度依存性、速度式の種々の表し方およびその解釈法について学ぶ		速度定数の概念、反応方程式とその積分、アレニウスの速度式について理解しているかどうか前期定期試験および後期中間試験、レポートで評価する。
3	【A4-C3】電池の全反応と半反応を理解する。		化学電池およびその電極反応、電極反応の平衡論並びにpHの変化を理解しているか後期中間試験およびレポートで評価する。
4	【A4-C3】原子の構造を、応用物理IIで学ぶ量子力学の知識を基に理解する。		原子構造とスペクトルの関係、原子の電子構造（構成原理、エネルギー項）について、応用物理IIで学んだ量子力学と関連づけて理解しているかどうか後期定期試験およびレポートで評価する。
5			
6			
7			
8			
9			
10			
総合評価		成績は、試験90% レポート10% として評価する。試験成績は年4回の平均とする。総合100点とし60点以上を合格とする。	
テキスト		「物理化学要論」：P. W. Atkins著 / 千原秀明・稲葉章 訳（東京化学同人）	
参考書		「アトキンス物理化学 第6版（上・下）」：P. W. Atkins（東京化学同人） 「物理化学-分子論的アプローチ-（上・下）」：D. A. McQuarrie, J. D. Simon（東京化学同人） 「化学反応はいかに進むか：反応の速度と機構」：E. L. キング（化学同人） 「初等量子化学 第2版」：大岩正芳（東京化学同人）	
関連科目		1～3年までの物理学・数学、応用物理I, II・化学工学I, II, 応用数学I, II	
履修上の注意事項		物理化学は、物理の視点から化学の基本原則を考察する教科であるので、当然、物理学とその基礎となる数学に精通していることが望ましい。1～3年までの物理学や数学のみならず、同時進行で学習する応用物理や応用数学の内容も必要となってくる。さらに、3年生の応用物理で学んだ熱力学も、反応速度論を中心に必要となる。これらの科目を復習したり、良く学習しておくことが望ましい。	

授業計画 1 (物理化学I)		
回	テーマ	内容(目標, 準備など)
1	相平衡と熱力学	3年生の応用物理で学んだ知識をもとに混合物の相平衡について、Gibbsのエネルギーの関係を含めて2週にわたり学習する。
2	相平衡と熱力学	3年生の応用物理で学んだ知識をもとに混合物の相平衡について、Gibbsのエネルギーの関係を含めて2週にわたり学習する。
3	化学平衡の原理	化学平衡を反応ギブスエネルギーを用いて説明することによって熱力学的な裏づけを学習する。また、平衡組成の計算を行う。平衡の移動に対する触媒の存在、温度の効果、圧縮の効果を3週にわたり学習する。
4	化学平衡の原理	化学平衡を反応ギブスエネルギーを用いて説明することによって熱力学的な裏づけを学習する。また、平衡組成の計算を行う。平衡の移動に対する触媒の存在、温度の効果、圧縮の効果を3週にわたり学習する。
5	化学平衡の原理	化学平衡を反応ギブスエネルギーを用いて説明することによって熱力学的な裏づけを学習する。また、平衡組成の計算を行う。平衡の移動に対する触媒の存在、温度の効果、圧縮の効果を3週にわたり学習する。
6	化学平衡の応用(プロトン移動平衡)	酸と塩基に関するブレンステッド-ロウリ-の理論で、酸はプロトン供与体で、塩基はプロトン受容体であることを理解し、プロトン化率を用いて弱酸、弱塩基の化学平衡に関する計算を行う。
7	化学平衡の応用(塩の水溶液, 溶解度平衡)	酸-塩基滴定に関するヘンダーソン-ハッセルバルクの式から酸、塩基の濃度とpHとの関係式が導かれることを理解し、緩衝作用、溶解度定数、共通イオン効果について学習する。
8	中間試験	中間試験
9	中間試験解答	中間試験の解答を黒板を用いて解説し、注意点を指摘する。
10	反応速度論: 概要	化学反応速度論の基本的事項について解説する。反応速度の概念、反応速度式とその解、実験的手法などについて解説する。
11	反応速度式	反応速度式の微分形、積分形について学ぶ。
12	反応速度式の温度依存性	アレニウスの関係式について解説する。反応速度定数と温度の間にアレニウスの関係式があること、アレニウスの関係式が反応の活性化エネルギーと頻度因子といった要素で決まることを講義する。
13	活性化エネルギーと頻度因子	活性化エネルギーが反応を起こすために乗り越えなければならないポテンシャル障壁であり、頻度因子が分子の衝突や立体因子に関わる量であること、濃度の積が衝突頻度と比例すること等を解説し、活性化エネルギー・頻度因子と反応速度定数が結びつくことを講義する。また、活性錯体理論や触媒作用についても触れる。
14	速度式の解釈: 素反応と反応機構	素反応(単分子・二分子反応)を定義し、通常反応が複合反応であることを示し、反応機構とその反応速度式について解説する。
15	速度式の求め方	逐次反応や定常状態近似、律速段階等の考え方をを用いて、複合反応の反応速度がどのようにして組み立てられるかを示す。
16	連鎖反応: 連鎖反応の構造, 爆発	連鎖反応について、反応速度式をどのように計算したらよいか、いくつかの例を示しながら講義する。
17	光化学反応	量子収率等の光化学に関わる基本的考え方を示し、光化学過程を含む複雑な反応の反応機構および反応速度式について解説する。
18	化学反応速度の理論的決定	衝突速度論、遷移状態理論、RRKM理論などの概略について説明する。
19	電気化学(イオンの移動)	電解質溶液中におけるイオンの電気伝導率、イオン移動度など、水溶液中のイオンの移動と電荷の移動について学ぶ。
20	電気化学(半反応と電極, 電池反応, 電極電位)	種々の電池の電池反応とその半反応を学ぶ。
21	電気化学(標準電位)	標準電位は標準水素電極の電位を基準に表されている。ネルンストの式について学習し、標準電位の考え方を学ぶ。
22	電気化学(熱力学関数の決定)	標準電極電位と標準反応ギブスエネルギーとの関係から反応式から電池の電圧が計算できることを学ぶ。
23	中間試験	中間試験
24	中間試験の解答	中間試験の解答を黒板を用いて解説し、注意点を指摘する。
25	原子構造: 水素型原子のスペクトル	水素原子のスペクトルを基に、水素型原子の構造を学ぶ
26	量子数と原子軌道のエネルギー・形	主量子数、方位量子数、磁気量子数の組み合わせと、水素型原子の電子の軌道の種類や特徴について解説する。
27	スペクトル遷移と選択率	水素型原子の中の電子遷移の選択率について解説する。
28	多電子原子の構造と周期律	水素型原子の構造の知識を基に、多電子原子の構造について理解する。構成原理を基に、オービタルの考え方を学ぶ。原子の性質に周期的な特徴がでることを示し、周期表を原子の電子構造より議論する。
29	多電子原子のスペクトル	原子のエネルギー準位を表す項について学習する。各全角運動量などにより種々の項が表現され、またL-Sカップリングにより、最低のエネルギー準位を表す項がどのように表されるのかを学ぶ。
30	演習	25 - 29週の講義内容に関する演習を行う
備考	本科目の修得には、60時間の授業の受講と30時間の自己学習が必要である。前期、後期ともに中間試験および定期試験を実施する。	