

科 目		化学反応論 (Chemical Kinetics and Dynamics)	
担当教員		渡辺 昭敬 教授	
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		A4-AC3(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-AC3】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中間試験で評価する。
2	【A4-AC3】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中間試験で評価する。
3	【A4-AC3】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中間試験およびレポートで評価する。
4	【A4-AC3】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評価する。
5			
6			
7			
8			
9			
10			
総合評価		成績は、試験70% レポート30% として評価する。試験成績は中間試験の結果を100%とする。100点満点で60点以上を合格とする。	
テキスト		「はじめての化学反応論」：土屋 荘次（岩波書店）	
参考書		「分子衝突と化学反応」：R.D.レヴィン，R.B.パースタイン著，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） 「電子構造論による化学の探究」：J.B.Foresman，A.Frish共著，田崎健三 訳（ガウシアン社） 「Gaussianプログラムによる量子化学計算マニュアル」：社団法人 新化学発展協会 編（丸善株式会社）	
関連科目		物理化学I，II，応用物理I，II	
履修上の注意事項		物理化学Iの反応速度を理解していることが望ましい。	

