

科目	物理化学Ⅱ (Physical Chemistry II)		
担当教員	渡辺 昭敬 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%)		
授業の概要と方針	3年生の応用物理Ⅰで学習した内容を基に,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	到達目標別の評価方法と基準
1	[A4-C3]反応速度論について理解する.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を理解する.		速度定数の概念,反応方程式とその積分解,定常状態近似,アレニウスの速度式,反応機構について理解しているか前期中間試験,レポートで評価する.
2	[A4-C3]量子論の基礎的事項について理解する.黒体放射,光電効果などからエネルギーが離散的である事,ならびにシュレディンガー方程式の解の性質や境界条件とエネルギーの関係を定性的に理解する.		黒体放射や電子線回折と絡んでエネルギーが離散的である事,またシュレディンガー方程式並びにその解について定性的に理解しているか前期定期試験,並びにレポートで評価する.
3	[A4-C3]原子の構造を,量子論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,量子論と関連づけて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]分子の構造を,量子論の知識を基に理解する.		分子軌道論を中心に主に二原子分子の電子構造,性質を量子論と関連付けて理解しているか後期定期試験およびレポートで評価する.
5	[A4-C3]固体の電子状態を理解する.		バンド理論,ボルンハーバーサイクルと格子エンタルピー,マーデルング定数を理解しているか後期定期試験およびレポートで評価する.
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点満点とし60点以上を合格とする.		
テキスト	「物理化学要論(第6版)」:P. W. Atkins・J.de Paula著/千原秀昭・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) 「アトキンス物理化学要論問題の解き方(第6版/英語版)」:David Smith(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) 「初めての化学反応論」:土屋荘次(岩波書店) 「なっとくする量子化学」:中田宗隆(講談社)		
関連科目	1~3年までの物理学,数学,応用物理Ⅰ,Ⅱ,分析化学Ⅰ,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理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年生の物理化学Ⅰ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 (物理化学 II)

	テーマ	内容 (目標・準備など)
1	熱力学の復習I	物理化学の理解に必要な不可欠な熱力学の復習を行う。主に熱力学の3法則, エンタルピー, エントロピーについて学習する。
2	熱力学の復習II	物理化学の理解に必要な不可欠な熱力学の復習を行う。主にギブズエネルギー並びに化学平衡論について学習する。
3	反応速度論: 概要, 反応速度式	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学習する。
4	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学習する。
5	活性化エネルギーと頻度因子	活性化エネルギーは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学習する。また, 活性錯体理論や触媒作用についても学習する。
6	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, 通常の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学習する。
7	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	量子論の出現	原子, 分子スペクトルと黒体放射, 光電効果について解説し, エネルギーが離散的である事を学習する。
11	シュレディンガー方程式と波動関数	シュレディンガー方程式の概念について解説する。と同時に波動関数の考え方についても学習する。
12	ボルの解釈, 不確定性原理	ボルの確率解釈について解説する。さらに, ド・ブロイ波と粒子の運動量の関係, 波動関数が確率振幅であることからハイゼンベルクの不確定性原理を解説する。
13	一次元井戸型ポテンシャル, 調和振動子	量子力学の基本でありかつ近似方等の応用の基本となる厳密に解ける系について解説する。1次元の井戸型ポテンシャルに拘束された粒子と一次元調和振動子を取り上げ, 量子論的考え方を学習する。
14	水素類似原子の構造: 量子数と原子軌道のエネルギー・形	中心力場に拘束された粒子を取り上げ, その解法を定性的に説明し, 主量子数, 方位量子数, 磁気量子数とその意味について解説する。また, これらの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し, 量子数と電子の存在確率の節・節面の数の関係から, 各軌道の形が予測できることを示す。
15	定期試験解答	前期定期試験の解答を黒板を用いて解説し, 注意点を指摘する。
16	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習する。
17	原子構造: 水素型原子の量子数	14回目の講義を基に主量子数, 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学習する。
18	スペクトル遷移と選択律	水素型原子の中の電子遷移の選択律について学習する。
19	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習する。原子の性質に周期的な特徴がであることを示し, 周期表を原子の電子構造より議論する。
20	多電子原子のスペクトル	原子のエネルギー単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, 最低のエネルギー単位を表す項がどのように表されるのかを学習する。
21	化学結合: 基本概念	化学結合の基本概念を解説する。
22	原子価結合法・分子軌道法	化学結合を考える際に用いられる, 原子価結合法と分子軌道法の基本概念を解説する。
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	分子軌道法: 水素分子イオンの形成	近似問題の基本となる変分法について解説してからLCAO近似を導入し, 分子軌道法を用いて, 一番簡単な系である水素イオン分子が形成し, 分子軌道が結合性軌道と反結合性軌道に分離することを解説する。
26	二原子分子	分子軌道法を用いて, 等核二原子分子の電子構造について解説し, 等核二原子分子の分子軌道の様子と電子構造から, 幾つかの化学的性質が説明できることを示す。さらに, 異核二原子分子の電子構造, イオン性と共有性についても簡単に触れる。
27	分子軌道法の種々の近似	分子軌道計算における種々の計算方法 (ヒュッケル法, ab initio法など) の概念について簡単に解説する。
28	金属とイオン性固体・バンド構造	分子軌道法の概念を固体の化学結合系に適用し, 固体ではバンド構造ができることを示し, バンドエネルギーやバンドギャップ, 導体, 半導体, 絶縁体をバンド構造から解説する。
29	格子エンタルピー, イオン性結晶とマーデルング定数	固体の凝集力として格子エンタルピーを示し, ボルン-ハーバーサイクルより格子エンタルピーを解説する。さらに, イオン性結晶の凝縮力はクーロン相互作用が主であることを示し, 結晶格子上にあるそれぞれのイオンのクーロン相互作用の和が, 結晶格子の構造で決まるマーデルング定数で簡潔に表されることを解説する。13
30	定期試験解答ならびに演習	後期定期試験の解答を黒板を用いて解説し, 注意点を指摘する。あわせて講義全体にわたって必要に応じた演習を実施する。
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。	