2025 年度シラバス

科目分類/Subject Categories			
学部等/Faculty	/工芸科学部 : /School of Science and 今年度開講/Availability /有:/		/有:/Available
	Technology		
学域等/Field	/物質・材料科学域 : /Academic Field of	年次/Year	/ 2 年次:/2nd Year
	Materials Science		
課程等/Program	/専門基礎科目 : /Specialized Foundational	学期/Semester	/後学期:/Second term
	Subjects		
分類/Category	/化学:/Chemistry	曜日時限/Day & Period	/月 2 : /Mon.2

科目情報/Course Information					
時間割番号	15021202				
/Timetable Number					
科目番号	15061054				
/Course Number					
単位数/Credits	2				
授業形態	講義:Lecture				
/Course Type					
クラス/Class	mb				
授業科目名	物理化学Ⅲ: Physical Chemistry Ⅲ				
/Course Title					
担当教員名	/一ノ瀬 暢之/若杉 隆/野々口 斐之 : ICHINOSE Nobuyuki/WAKASUGI Takashi/NONOGUCHI				
/ Instructor(s)	Yoshiyuki				
その他/Other	インターンシップ実施科	国際科学技術	ドコース提供	PBL 実施科目 Project	DX 活用科目
	目 Internship	科目 IGP		Based Learning	ICT Usage in Learning
	実務経験のある教員によ				
	る科目				
	Practical Teacher				
科目ナンバリング	B_PS2330		·		
/Numbering Code					

授業の目的・概要 Objectives and Outline of the Course

- 日 物理化学「で習った熱力学の基本的概念を基礎として、化学平衡およびその応用として平衡電気化学を取り扱う。また、物理化学 II で学習したように分子のエネルギー状態が量子化されていることを踏まえ、分配関数を取り扱うことができるようにする。これらの統計力学的取り扱いを通じて分子集団のエネルギー分布(ボルツマン分布)、エントロピー、化学平衡の意味を理解する。さらに、化学反応による分子種の濃度の時間推移(反応速度論)と、その基本的な理論について学習し、反応の時間変化の予測、解釈ができるようにする。反応速度論では、活性化エネルギーの概念および定常状態近似から得られる平衡定数や中間体濃度についても学習する。
- Chemical equilibrium and equilibrium electrochemistry are introduced on the basis of the fundamental concept of thermodynamics studied in Physical Chemistry I. Statistical thermodynamics (statistical approach to molecular systems with quantized energy levels as learned in Physical Chemistry II) is introduced to obtain several thermodynamic functions. Students are supposed to understand the energy distribution in the molecular systems (the Boltzmann distribution), statistical entropy, and chemical equilibrium through the study of statistical thermodynamics. Chemical kinetics and related area are also introduced. Students are supposed to learn rate equations to understand the reaction kinetics of reactants and products in chemical reactions as a function of time. The chemical kinetics also provides a concept of activation energy and the stationary state approximation which gives a kinetic expression of the equilibrium constants and an estimate of concentration of chemical intermediates.

学習の到達目標 Learning Objectives

日 化学平衡に関して化学ポテンシャルから平衡定数を導くことができる。 自由エネルギー、標準電位、平衡定数の間にある関係を理解する。 分子エネルギーの量子化とエネルギー準位へのボルツマン分布を理解する。 ボルツマン分布から分配関数を作ることができる。

分配関数からエントロピー、内部エネルギーなどの熱力学関数を誘導できる。

平衡定数を分配関数で表すことができる。平衡定数の意味を理解する。

化学反応速度における反応速度式(微分形)をつくり、その積分形を誘導する。

反応機構から反応速度式(微分形)をつくり、定常状態法を適用する

反応速度定数の温度依存性を理解する。

反応速度論の観点から化学平衡を理解し、平衡定数を反応速度定数で表現できる。

To derive the equilibrium constant from the equation of chemical potentials of the components.

 $\label{thm:constant} \mbox{To understand the relationship among the free energy, standard potential, and equilibrium constant.}$

to understand the meaning of the equilibrium constant through its expression with partition functions of the components.

To derive partition functions from the Boltzmann distribution.

To derive thermodynamic functions such as entropy and internal energy from partition functions.

To express the equilibrium constant with partition functions.

To make differential rate equations and derive their integrated forms.

To make a set of differential rate equations from a reaction mechanism and to apply the stationary state approximation.

To understand the temperature-dependence of rate constants.

To understand the equilibrium from the kinetic viewpoint.

学習目標の達成度の評価基準 / Fulfillment of Course Goals(JABEE 関連科目のみ)		
日		
英		

授業	授業計画項目 Course Plan				
No.		項目 Topics	内容 Content		
1	日	化学反応とギブズ自由エネル	反応進行度とギブズ自由エネルギーの変化および平衡定数について。		
		ギー			
	英	Extent of reaction and a	To learn the reaction Gibbs energy as a function of the extent of reaction and to derive		
		change in Gibbs free energy	the equilibrium constant.		
2	日	平衡定数とその温度、圧力依存	自由エネルギーから見た平衡定数の意味、および温度・圧力による変化、ルシャトリエ		
		性	の原理を数式により理解する。		
	英	Temperature and pressure	To learn the relationship of the equilibrium constant and temperature or pressure.		
		dependences of equilibrium	To understand the Le Chaterier's principle through the mathematical expression of		
		constant	the equilibrium constant.		
3	日	平衡電気化学(1)	電荷を電位に対して移動させる仕事から電池半反応、電池と電極の種類、標準電極電位、		
			起電力とネルンストの式までを理解する。		
	英	Electrochemical cell (1)	To understand electrochemical cells consisted from half-reactions of electrodes and		
			their variations. To understand electromotive force of cells, the standard		
			electrochemical potential, and the Nernst equation from the work for bringing a		
			charged particl		
4	日	平衡電気化学(2)	電位・電気化学と平衡定数および熱力学関数との関係		
	英	Electrochemical cell (2)	To learn the relationship between electrochemical potentials and the equilibrium		
			constant and thermodynamic functions of the cell reaction.		
5	日	統計熱力学(1)	量子化された分子のエネルギーと統計熱力学の概念について。		
	英	Statistical thermodynamics	Statistical thermodynamics (1)		
		(1)			
6	日	統計熱力学(2)	ボルツマン分布と分配関数について学習し、分子のエネルギー準位とボルツマン分布を		
			用いた集団のエネルギーの計算式を導く。		
	英	Statistical thermodynamics	To derive the equation for mass energy from the partition function assuming the		
		(2)	Boltzmann distribution of molecular energy to the quantized levels.		
7	日	統計熱力学(3)	ボルツマン分布と統計エントロピーについて学習する。		
	英	Statistical thermodynamics	To derive statistical entropy from molecular and canonical partition functions.		
		(3)			
8	日	統計熱力学(4)	分子分配関数およびカノニカル分配関数から熱力学関数を導く。		

	英	Statistical thermodynamics	To derive several thermodynamic functions from molecular partition functions based
		(4)	on the Boltzmann distribution.
9	日	統計熱力学(5)	統計熱力学の応用、平衡定数の分配関数による表現を理解する。
	英	Chemical kinetics (1)	Application of statistical thermodynamics: to understand the expression of
			equilibrium constant using molecular partition functions.
10	日	化学反応速度(1)	実験方法と速度式の取り扱い。反応速度、反応次数の定義、素反応、一次反応、二次反
			応における反応物、生成物の濃度変化。
	英	Chemical kinetics (2)	Experimental methods for measuring of reaction rates, treatment of rate equations.
			Definition of reaction of rates and reaction order, elementary reactions. Concentration
			changes of reactants and products in the first order and the second order reactions.
11	日	化学反応速度(2)	平衡を含む反応、ジャンプ法
	英	Chemical kinetics (2)	To learn the reactions approaching equilibrium and relaxation methods.
12	日	化学反応速度(3)	反応速度の温度依存性について。アレーニウス型の反応速度定数の温度依存性について
			学習する。
	英	Chemical kinetics (3)	To learn the Arrhenius equation to understand the temperature dependence of
			reaction rates.
13	日	化学反応速度(4)	反応機構:逐次反応、前駆平衡について理解し、反応物、生成物の濃度変化や化学反応
			中間体についての考察を行う。
	英	Chemical kinetics (4)	To learn reaction mechanisms by studying consecutive reactions and pre-equilibria,
			considering of changes in concentrations of reactants, products and chemical
			intermediates.
14	日	化学反応速度(5)	定常状態近似と連鎖重合反応、光化学、酵素反応などの複雑な反応の速度について。
	英	Chemical kinetics (5)	To learn the steady state approximation to understand the mechanisms of complex
			reactions such as unimolecular reactions, chain reactions, polymerization, catalytic
			reactions, and enzyme.
15	日	化学反応速度(6)	反応の分子動力学と遷移状態理論、反応速度の熱力学的な見方について。
	英	Chemical kinetics (6)	To learn some aspects in reactions from the kinetic and thermodynamic viewpoints
			derived from the transition state theory.

履修条件 Prerequisite(s)

- 日 受講前に化学 I、II、物理化学 I、IIの理解を前提としている。その他に数学、物理の科目を履修することが望ましい。特に、分子のエネルギーが量子化されていることなど、講義内で必要とされる概念については、教科書の授業で用いる以外のページに書かれているので、各自で独習を要する。
- 英 The class will be given assuming the completion of Chemistry I and II, Physical Chemistry I, II. Hopefully, other classes for mathematics and physics should be taken. Since the concepts required in the class such as the quantized molecular energies are given in the pages in the other sections of the textbook, they should be learned by yourselves.

授業時間外学習(予習・復習等)

Required study time, Preparation and review

日 物理化学 I-IIIは、一連の科目として系統的に教えられている。従って、本科目の受講には物理化学 I、II の内容の理解が絶対的 条件である。受講にあたっては、教科書の予習、復習を 1 時間程度行うこと。

学則にしたがう単位の定義より以下のことに留意すること。

「本学では1単位当たりの学修時間を45時間としています。毎回の授業にあわせて事前学修・事後学修を行ってください。」

Physical Chemistry I-III are given systematically as consecutive classes. Completion of Physical Chemistry I and II should be required to take the Physical Chemistry III class. For the better understanding of the subjects in the class, studying of the Physical Chemistry text book before and after the class would be of great help and is strongly recommended.

Officially YOU are requested to remind the following definition of the credit:

"Please note that KIT requires 45 hours of study from students to award one credit, including both in-class instructions as well as study outside classes. Students are required to prepare for each class and complete the review after each class."

教科書/参考書 Textbooks/Reference Books

- ∃ | 教科書 アトキンス 物理化学上・下 第 10 版(千原・中村共訳、東京化学同人).
- 英 P. W. Atkins and J de Paula, Physical Chemistry 12th Ed., Oxford (2022).

成績評価の方法及び基準 Grading Policy

日 期末試験の成績により評価する。

大体の基準は、以下を参照。

予習・復習をして講義を聞き、ノートを取って授業内容を理解していることが判る程度、式の誘導など、基礎的な問題を解くことができる (60-75 点)。 さらに応用的な問題、課題に取り組む能力がある (>75 点)。

英 Grade will be estimated by the term-end examination. Criteria are as follows: judged as a person at a level (60-75%) who can solve basic problems and derive the equations through the understanding the subject of the class by skimming and reading carefull

留意事項等 Point to consider

- 日 この授業は化学平衡、統計熱力学、反応速度論の3つの大きなトピックを含み互いに関連しているので、続けて欠席すると解らなくなるので注意すること。
- 英 This class includes three large topics of chemical equilibrium, statistical thermodynamics, and reaction kinetics. Since they are closely related each other, attendance is necessary for understanding of the whole course.