

## Physical Chemistry

2 units (compulsory)

Eiji Kanazaki · PROFESSOR / PHYSICO-CHEMICAL AND MATERIALS SCIENCE, DEPARTMENT OF CHEMICAL SCIENCE AND TECHNOLOGY

**Target)** 基礎物理化学で学習した化学熱力学に引き続き、系の平衡状態を記述する方法論の一つである化学統計熱力学の基礎について述べ、3年後期に開講される量子化学への橋渡しを行う。系の巨視的な記述方法である熱力学関数が、微視的な存在である分子の性質をどのように反映しているかを、分配関数の計算を通じて理解し、物質系のマクロスコピックな性質が、物質系を構成するミクロスコピックな分子の性質と密接に結び付いている事を知る事が本講義の目的である。基礎物理化学、物理化学及び量子化学の3科目で、「物理化学」という巨大な学問体系の骨格の記述を完結させる。時間があれば、具体例の一つとして、統計的な協同現象である分子の電氣的及び磁氣的性質等についても触れたい。

**Outline)** 化学統計熱力学の基礎について述べる。

**Keyword)** *partition function, thermal equilibrium*

**Fundamental Lecture)** “Basic Physical Chemistry”(0.5)

**Relational Lecture)** “Quantum Chemistry”(0.5)

**Notice)** 英文の教科書を使用するので予習及び復習すること。パソコンで表計算しグラフを作成する準備をしておくこと。講義の理解のためには、2時間の授業時間毎に2時間の予習と2時間の復習とが必要である。講義中は、講義に集中し、私語等は慎むこと。

**Goal)**

1. 化学統計熱力学の基礎的概念を理解できる
2. 化学統計熱力学の基礎的概念を用いて簡単な系の記述ができる
3. 熱力学的諸関数を分配関数を用いて算出できる

**Schedule)**

1. Introductory remark
2. chap.16 Configuration and weights, instantaneous configurations
3. Boltzman distribution
4. Molecular partition function
5. Approximations and factorizations
6. Internal energy and entropy
7. Canonical partition function
8. Independent molecules
9. chap. 17 Fundamental relations, thermodynamic functions
10. Molecular partition function (again)

11. Vibrational contribution
12. Overall partition function
13. Mean energies
14. Residual entropy
15. Equilibrium constants
16. Examination

**Evaluation Criteria)** 定期試験と授業の取り組み及びレポート(宿題)により評価。レポート提出期限は次回の講義開始時刻である。期限後に提出されたレポートは評価しない。最終評価における定期試験とそれ以外の割合は60対40である

**Relation to Goal)** 本学科教育目標(A: ○), (B: ◎)に対応する

**Textbook)** P.W.Atkins & J.Paula, Physical Chemistry, 9th ed., Oxford University Press, 2010.

**Reference)** 講義の中で適宜紹介する。

**Contents)** <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=216362>

**Student)** Able to be taken by only specified class(es)

**Contact)**

⇒ 金崎(化511, 656-9444, kanazaki@chem.tokushima-u.ac.jp) (Office Hour: 年度毎に学科の掲示を参照すること)

**Note)** 上記授業計画は変更される場合があります。教科書の改訂版が出版された場合には新しい版を教科書とします。