物理化学（分子運動論）

本講義では，分子運動（主に気体分子），統計熱力学の基礎，ボルツマン分布，分子分配関数，衝突理論と遷移状態理論について解説する．化学反応を理解する上で，反応速度を解析することが重要である．本講義では，気体の分子運動論と統計熱力学から，それぞれ衝突理論と遷移状態理論を用いることによって，化学反応の速度を導き出せる能力を養う．なお講義第 6 回（第 10 章）のみその流れとは別の流れの分子運動論の内容を取り扱う．

教科書：アトキンス物理化学（上）（下）第 10 版　東京化学同人

第 0 回（予習）	数学・熱力学の復習	2C.1&3, 3C.1&2, 3D.2, 6A.1&2, 15A.1
第 1 回	気体の運動論モデル・気体分子の衝突	1B.1&2
第 2 回	衝突理論	20D1&2, 21A.1
第 3 回	ボルツマン分布・分子分配関数	8B.1, 12B.2, 15A.1&2, 15B.1&2, 15D.1
第 4 回	熱力学関数・化学平衡	6A.1&2, 15C.1&2, 15D.3, 15E.2, 15F.1&2
第 5 回	遷移状態理論・分子衝突の動力学	20E.5, 21C.1, 21C.2,21D.3
第 6 回	輸送現象	19A.1&2, 19C.1~3
第 7 回	理解度確認のための演習と解説	

授業は，教科書を参考にしながらこの配布資料を元に行う．

また配布資料中には「分子の **(1) 並進エネルギー** だけであると仮定し」など空欄を散りばめている．空欄を埋めながら講義を聴講して欲しい．

第 0 章　数学・熱力学の復習・・・高分子統計力学と重複（**§0.2** まで）

§0.1　順列・組み合わせ

§0.2　配置の重み

§0.3　熱化学

§0.4　ギブズエネルギー

§0.5　化学平衡（熱力学）

§0.6　グリーン関数（発展的話題）

第 1 章　気体の運動論モデル

§1.1　速度分布関数
§1.2　気体の圧力
§1.3　速さのマクスウェルーボルツマン分布
§1.4　平均運動エネルギー・平均速さ

第 2 章　気体分子の衝突
§2.1　相対運動
§2.2　平均相対速さ
§2.3　衝突頻度
§2.4　平均自由行程
§2.5　詳細釣り合いの原理（発展的話題）
§2.5.1　微分散乱断面積
§2.5.2　詳細釣り合いの原理
§2.6　ボルツマン方程式（発展的話題）
§2.6.1　ボルツマン方程式
§2.6.2　連続の方程式
§2.6.3　緩和過程
§2.7　ボルツマンの H 定理（発展的話題）

第 3 章　衝突理論
§3.1　アレニウスの式
§3.2　衝突密度
§3.3　衝突理論
§3.4　立体因子

第 4 章　ボルツマン分布・・・高分子統計力学と重複（§4.4 を除く）
§4.1　小正準集団
§4.2　ボルツマン分布
§4.3　熱力学的温度
§4.4　古典力学の例
§4.5　正準集団

第 5 章　分子分配関数・・・高分子統計力学と重複（§5.3 まで）
§5.1　n-準位系
§5.2　分子のエネルギー
§5.3　並進分配関数

§5.4　回転分配関数
§5.5　振動分配関数

第６章　熱力学関数・・・高分子統計力学と重複（§6.4 まで）
§6.1　ｑとＱの関係
§6.2　内部エネルギー
§6.3　エントロピー
§6.4　ヘルムホルツエネルギー
§6.5　ギブズエネルギー

第７章　化学平衡
§7.1　化学平衡（統計力学）
§7.2　化学平衡の物理的解釈

第８章　遷移状態理論
§8.1　前駆平衡
§8.2　遷移状態理論
§8.3　アイリングの式（アトキンスのアプローチ）
§8.4　アイリングの式（マッカーリのアプローチ）
§8.5　活性化パラメーター

第９章　分子衝突の動力学
§9.1　ポテンシャルエネルギー面
§9.2　量子化学計算の実例

第１０章　輸送現象
§10.1　現象論
§10.2　分子論的解釈
§10.3　拡散
§10.3.1　熱力学的アプローチ
§10.3.2　拡散方程式
§10.3.3　統計力学的アプローチ