

| | | | |
|-----|-------|---------|--------------|
| 科目名 | 化学熱力学 | JABEE科目 | 科目コード 808 |
|-----|-------|---------|--------------|

| | | | |
|---------|-------|-----------------|--------|
| 学年・学科等名 | 1 学年 | 応用化学専攻 | 専門的・選択 |
| 単位数・開講期 | 2 単位 | 後期 | |
| 総時間数 | 90 時間 | 講義 30 + 自学自習 60 | |
| 担当教員 | 高田 知哉 | | |

| | | |
|---------|-----------------|-------------------|
| JABEE関連 | 教育プログラム科目区分 | 301専門工学科目①専門応用系 |
| | 教育プログラムの学習・教育目標 | D-1(50%) D-2(50%) |
| | JABEE基準 | d |

| | |
|------|---|
| 教科書名 | 化学系のための統計熱力学(小島・越智 著、培風館) |
| 補助教材 | プリント(講義資料、演習問題) |
| 参考書 | ムーア 基礎物理化学(上)(W. J. Moore 著、東京化学同人) 基礎化学熱力学(E.B.Smith 著、化学同人)その他 |

A. 教育目標

これまで物理化学で学んだ熱力学と微視的分子論とを関係づける「統計熱力学」の基礎を理解する。

B. 概要

古典的な熱力学は系の巨視的(マクロ)な性質により構築される理論体系であるが、統計熱力学は微視的(ミクロ)な性質と巨視的な性質を結びつける理論体系であり、分子・原子といった化学的な実体をよりあらわに考慮した理論であるといえる。この科目では、統計熱力学の基本概念である微視的状态・ボルツマン分布・分配関数などの説明からはじめ、次いで古典的熱力学量との関連や化学への応用について説明する。また、集合(アンサンブル)の概念と取り扱いについても述べる。

C. 学習上の留意点

統計熱力学は難解であるといわれることが多い。授業中の説明をただ聞くだけで全てを理解することは困難なので、十分な自学自習をすることが望まれる。教科書を見直し、自分自身で理論を整理することで理解が深まる。

科目の性質上、これまで学んだ熱力学・数学の基礎知識が身に付いていることが必須であるので、必要に応じて自主的に復習すること。

単に数量的な取り扱いに終始するだけでなく、諸量の物理的意味を把握し、現象の描像を常に意識すること。本科での物理化学では数値を扱う計算も多く取り扱ったが、この科目では数値計算は少なく、関係式の解析的取り扱いが大半となる。

D. 評価方法

試験(60%) 演習問題・課題(40%)

※学年末の評価で60点未満である者については、定期試験の分を再評価するための再試験を、学年末に1回行なう。(再試験を経た場合の評価点の上限は60点とする)

E. 授業内容

| 授業項目 | 時間 | 内 容 | 教 育 プログラム |
|----------|----|---|--------------|
| 序論、ミクロ状態 | 2 | 統計熱力学での現象の捉え方を理解し、応用できる。ミクロ状態数の扱い方について理解し、計算することができる。 | D-1 D-2 |
| ボルツマン分布 | 2 | 平衡状態における分子の状態間の分布を表すボルツマン分布を導くことができる。 | D-1 D-2 |

| 授業項目 | 時間 | 内 容 | 教 育 プログラム |
|---|----|--|--------------|
| 分子分配関数 | 4 | 分子分配関数の物理的意味を理解し、内部エネルギー U およびエントロピー S を分子分配関数を用いて表すことができる。 | D-1 D-2 |
| 集合分配関数 | 4 | 集合分配関数の物理的意味を理解し、熱力学諸量を集合分配関数を用いて表すことができる。 | D-1 D-2 |
| 理想気体への応用 | 6 | 理想気体(単原子分子、多原子分子)の並進・回転・振動・電子分配関数について理解し、熱力学諸量の取り扱いに応用できる。 | D-1 D-2 |
| 結晶固体への応用 | 2 | 統計熱力学による固体の熱容量の取り扱い(Einstein の式、Debye の式)について理解し、計算を行なうことができる。 | D-1 D-2 |
| 化学平衡 | 6 | 分子の性質から化学反応の平衡状態を決定する方法を理解し、平衡組成の計算を行なうことができる。 | D-1 D-2 |
| 分子間相互作用のある系 | 4 | カノニカルアンサンブルおよびカノニカル分配関数について理解し、熱力学諸量の表現に応用できる。分子間ポテンシャルを考慮して、実在気体の熱力学諸量を求めることができる。 | D-1 D-2 |
| (後期期末試験) | | | |
| ※自学自習 ・授業内容の復習、予習 ・演習問題、課題 ・定期試験準備 | 60 | 授業内容の復習・予習、授業中に行なった演習問題の解法の見直し、課題として課された問題のレポート作成、定期試験準備のための時間を合わせて 60 時間とする。 | D-1 D-2 |

F. 関連科目

物理化学、応用物理