

「化学反応論 I」

- ✓ 4月3日2限(10:25~12:10)に初回のオンライン講義(Zoom)を実施します。接続チェックも兼ねていますので、ガイドに従ってオンライン講義を受講してください。

【講義の進め方】

- ✓ Zoomによるオンライン講義。講義資料は各自で指定のURLより事前にダウンロードしプリントアウトしておいてください。講義資料の内容を説明するとともに、ホワイトボードに重要事項を順次書き込んでいきますので、講義資料等にメモ取って行ってください。
- ✓ 講義資料に、当日のZoomのミーティングアドレスが記載されていますので、そこにアクセスしてください。必ずECCSアカウント受講してください。
- ✓ 講義資料は、<http://www.park.itc.u-tokyo.ac.jp/yamaguchi/lecture.html>よりダウンロードできます。特定の教科書は使いません。講義資料は自分の学修のためだけに活用してください。ダウンロードパスワードは、4月3日の講義であれば「kinetics0403」です。後ろの4桁は講義日実施日です。
- ✓ 簡単な演習問題を毎回行いますので、関数電卓を必ず用意しておいてください。
- ✓ 講義中の質問やコメント等は、「チャット」や「手を挙げる」等を活用してください。講義後の質問やコメント等は、「t-kyama@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp」までお願いします。

【講義概要】

1 化学反応速度論の基礎

化学反応の速度をどのように測定・解析・解釈するかを示すことによって、化学反応速度論の基礎を学ぶ。まず、反応をモニターするための様々な実験的測定方法や化学反応の熱力学を理解する。次に、反応速度が、速度式という微分方程式で表されること、および、速度式、速度定数、反応次数の定義と測定原理を理解する。反応速度の温度依存性（アレニウス式）も理解する。

- 1.1 化学反応速度論とは
- 1.2 化学反応速度の実験的な測定法
- 1.3 反応系の熱力学
 - 1.3.1 反応速度の定義
 - 1.3.2 反応の駆動力
- 1.4 速度式・速度定数・反応次数
- 1.5 積分型速度式
 - 1.5.1 0次反応
 - 1.5.2 1次反応
 - 1.5.3 2次反応
 - 1.5.4 半減期
- 1.6 速度式の実験的な求め方
 - 1.6.1 擬1次速度法（分離法）
 - 1.6.2 初速度法
 - 1.6.3 グッゲンハイム法
- 1.7 可逆反応
 - 1.7.1 平衡に近い反応
 - 1.7.2 緩和法
- 1.8 反応速度の温度依存性

2 素反応の理解と複合反応の速度式

素反応，複合反応について解説する。多くの化学反応が様々な素反応からなる複合反応であることを説明する。並列反応，逐次反応などについて，反応機構に基づいて速度式の導出を行う。反応の律速過程という概念や反応中間体に関する定常状態近似についても理解する。

- 2.1 素反応
- 2.2 並列（平行）反応
- 2.3 逐次反応
- 2.4 定常状態近似と律速過程
- 2.5 前駆平衡のある反応
- 2.6 複雑な反応
 - 2.6.1 ラジカル連鎖反応
 - 2.6.2 均一系触媒反応
 - 2.6.3 酵素反応
- 2.7 複合反応の温度依存性
- 2.8 速度論支配と平衡論支配

3 速度論的同位体効果

同位体効果について解説する。まず，調和振動子モデルを用いて2原子分子（C-H，C-D）の同位体効果の理論的解釈について解説する。次に，具体例を挙げて，1次同位体効果，2次同位体効果について詳しく解説する。同位体を使った反応機構の解析方法についても具体例を挙げて解説する。

- 3.1 速度論的同位体効果とは
- 3.2 調和振動子の固有エネルギー
- 3.3 同位体標識反応
- 3.4 1次速度論的同位体効果
- 3.5 2次速度論的同位体効果
- 3.6 同位体トレーサー法

【参考書等】

1. P. Atkins, J. de Paula（千原秀昭，中村亙男 訳）：アトキンス物理化学（下）第8版，東京化学同人，2006（第22章，第23章）。
2. 第4版 実験化学講座11 反応と速度，日本化学会編，丸善，1992.
3. 慶伊富長：反応速度論 第3版，東京化学同人，2001.
4. 藤川高志，朝倉清高：化学のための数学，裳華房，2004.
5. 斎藤恭一：道具としての微分方程式，講談社，1994.

【成績評価】

期末テスト1回 + レポート課題（レポート課題のウエイトは10%程度）