

## 物理化学Ⅰ－シラバス(1)

### <概要>

高校で学んだ化学と大学で学ぶ化学との橋渡しをする目的でこの科目を設置している。講義内容は化学の基本から始め、大学で学ぶ物理化学Ⅱ～Ⅵに関係したものの[前期量子論・原子軌道・化学結合(物理化学Ⅳ・Ⅴ), 溶液・化学平衡・化学反応速度(物理化学Ⅱ・Ⅲ)]が主であるが、無機化学・分析化学・有機化学の基礎としても役立つように意識して講義を進める。(レジメ(pdfファイル)持参のこと)

### 到達目標

- (1) 化学の基本と単位を理解している。
- (2) 水素原子のスペクトルとボーアの水素原子モデルを理解している。
- (3) 量子数と原子軌道の関係を理解している。
- (4) 化学結合(共有結合・混成軌道など)について定性的に理解している。
- (5) 化学平衡の原理を理解している。
- (6) 酸塩基反応, 酸化還元反応や反応速度式を書き下すことができる。

物理化学Ⅰを履修するには、高校での物理を学んでいることが望ましい。

なお、本科目は「学習・教育目標 A:理工学において基礎となる知識の修得, (3)数学および物理学を含む理工学基礎」に含まれる。

## 物理化学Ⅰ－シラバス(2)

### <授業計画>

- |      |                                       |
|------|---------------------------------------|
| 第1回  | 化学の基本と単位                              |
| 第2回  | 原子の構造と性質:水素原子の発光スペクトルと<br>ボーアの水素原子モデル |
| 第3回  | 原子の構造と性質:電子の波動性, 軌道関数と電子配置            |
| 第4回  | 原子の構造と性質:電子配置と周期表,<br>イオン化エネルギーと電子親和力 |
| 第5回  | 原子から分子へ:共有結合( $\sigma$ 結合), 混成軌道      |
| 第6回  | 原子から分子へ:共有結合( $\pi$ 結合), 配位結合         |
| 第7回  | 原子から分子へ:極性分子と電気陰性度, 分散力, 水素結合         |
| 第8回  | 分子の世界:相図, 溶液の濃度と蒸気圧                   |
| 第9回  | 化学平衡:平衡定数とル・シャトリエの原理                  |
| 第10回 | 酸と塩基:酸と塩基の定義, 酸と塩基の解離平衡               |
| 第11回 | 酸と塩基:中和滴定と加水分解, 緩衝溶液                  |
| 第12回 | 酸化と還元:酸化数, 電池の起電力                     |
| 第13回 | 反応の速度:反応のエネルギープロファイル, 反応速度式と反応機構      |
| 第14回 | 演習問題                                  |
| 第15回 | まとめ                                   |

## 物理化学Ⅰ-シラバス(3)

### <成績評価>

到達目標の到達度を下記の点数配分により総合的に評価し、100点満点で評価して、到達目標における基礎的事項を身に付けていると判断できる60点以上を合格(D以上)とする。

#### 中間レポート 30%

講義内容の理解度を深めるため、演習課題を課す。  
レポートとしてまとめて提出すること。

#### 期末筆記試験 70%

化学の基礎に関する講義内容の理解度を問う問題や  
章末問題レベルの問題が解けること。

### <テキスト>

浅野努・上野正勝・大賀恭共著、『FRESHMAN化学』(学術図書出版社)

## pdf ファイル

<http://www1.doshisha.ac.jp/~bukka/lecture/index.html>

- 授業での注意事項: 他人の迷惑になる行動は取らないこと。
  - (1)しゃべらないこと
  - (2)携帯は切ること
  - (3)授業中での入退室は禁止

## 第1章 化学の基本

## 1.1 物質の分類 (物質-体積と質量をもつものすべて)

・物質を構成する基本単位は**原子**

(原子)	(電気量)	(質量)	(記号)
原子核 陽子	$+1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$	$1.6726 \times 10^{-27} \text{ kg}$	$\text{H}^+, \text{p}$
中性子	0	$1.6749 \times 10^{-27} \text{ kg}$	n
電子	$-1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$	$9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$	$\text{e}^-, \text{e}$

- ・質量数=陽子の数+中性子の数 <元素記号の左上  $^{12}\text{C}$ >  
(陽子と中性子 1 molの質量は約1 g)
- ・原子番号=陽子の数(電子の数) <元素記号の左下  ${}_6\text{C}$ > (原子の性質)

- ・**元素**: 同一の原子番号を有する原子の種類(同位体も含む)
- ・**単体**: 1種類の元素からなるもの
- ・**原子, 分子などの集合体**
  - ・**純物質(表1.1)**  
1種類の元素からなる**単体**と, 2種類以上の元素からなる**化合物**
  - ・**混合物**  
2種類以上の**純物質**が**混合**してできたもの  
均一混合物, 不均一混合物

表1.1 単体と化合物の例

単体	酸素 オゾン 水銀 金 ダイヤモンド グラファイト
化合物	アンモニア 水 塩化ナトリウム ブドウ糖 水晶

## 1.2 巨視的観点と微視的観点

表1.2 水の微視的性質と巨視的性質

微視的性質	巨視的性質
1分子の質量 $2.99 \times 10^{-26} \text{ kg}$	分子量 18.015
結合距離O-H 95.79 pm	融点(凝固点) 273.15 K (= 0 °C)
結合角∠HOH 104.5°	沸点 373.15 K (= 100 °C)
双極子モーメント $6.19 \times 10^{-30} \text{ C m}$	三重点 273.16 K (= 0.01 °C)
H-OH結合解離エネルギー 492 kJ mol <sup>-1</sup>	熱容量* 4.1793 J K <sup>-1</sup> g <sup>-1</sup>
	蒸気圧* 3.17 kPa (=23.8 mmHg)
	密度* 0.997 g cm <sup>-3</sup>
	イオン積* $1 \times 10^{-14} \text{ mol}^2 \text{ dm}^{-6}$

\* 25 °Cにおける値

- ・**微視的性質**: 分子1個についての性質
- ・**巨視的性質**: 目に見える程度に数多くの分子が集まったときに測定できる性質  
(**分子間相互作用** ← 分子の性質)

### 1.3 元素の名称と元素記号

- ・通常, 単体は元素の名前で呼ばれる(酸素・水素・ $\cdot\cdot$ )。
- ・2種類以上の単体として存在する元素
  - 同素体: 元素は同じだが, 分子構造や結晶構造が異なる。
  - 酸素とオゾン, グラファイト(黒鉛)とダイヤモンド
- ・表1.3~1.5 元素名の由来と元素記号の例

### 1.4 元素記号の使い方

- ・分子式: 分子を構成する原子の種類(元素記号)と数で示す。

表1.6 分子式と分子の名称 (注意: 希ガス-単原子分子)

分子式	名称 [英語名]	分子式	名称 [英語名]
H <sub>2</sub>	水素 [hydrogen]	N <sub>2</sub>	窒素 [nitrogen]
O <sub>2</sub>	酸素 [oxygen]	CO	一酸化炭素 [carbon monoxide]
CO <sub>2</sub>	二酸化炭素 [carbon dioxide]	HCl	塩化水素 [hydrogen chloride]
CH <sub>4</sub>	メタン [methane]	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	エタン [ethane]
CH <sub>3</sub> O	メタノール [methanol]	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	エタノール [ethanol]
He	ヘリウム [helium]	Ne	ネオン [neon]

- ・組成式: イオン結晶[カチオン(陽イオン) + アニオン(陰イオン)]

表1.7 イオン性化合物の例

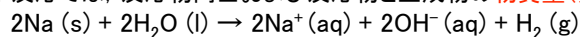
組成式	含まれるイオン	名称 [英語名]
NaCl	Na <sup>+</sup> Cl <sup>-</sup>	塩化ナトリウム [sodium chloride]
KOH	K <sup>+</sup> OH <sup>-</sup>	水酸化カリウム [sodium hydroxide]
MgO	Mg <sup>2+</sup> O <sup>2-</sup>	酸化マグネシウム [magnesium oxide]
CaCO <sub>3</sub>	Ca <sup>2+</sup> CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	炭酸カルシウム [calcium carbonate]
(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	硫酸アンモニウム [ammonium sulfate]
Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Ba <sup>2+</sup> NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	硝酸バリウム [barium nitrate]

イオン性化合物(電気的に中性)

書き順: 英語(カチオン名 + アニオン名), 日本語(書き順逆)

### ・化学量論

化学反応では, 反応物同士および反応物と生成物の物質(数)比は一定



化学量論係数: 反応式での係数(単なる数値-単位はない)

### 1.5 原子番号と同位元素

- ・原子番号: 陽子の数(電子の数)
- ・質量数: 陽子の数+中性子の数
- ・同位元素(同位体)  
原子番号は等しいが, 質量数が異なる元素  
(陽子の数は等しいが, 中性子の数が異なる元素)

表1.8 同位元素の例

元素	天然に存在する同位体とその割合(%)*
水素	$^1\text{H}$ (99.985) $^2\text{H}$ (0.015) $^3\text{H}$ 極めて微量
ホウ素	$^{10}\text{B}$ (19.9) $^{11}\text{B}$ (80.1)
炭素	$^{12}\text{C}$ (98.90) $^{13}\text{C}$ (1.10)
窒素	$^{14}\text{N}$ (99.634) $^{15}\text{N}$ (0.366)
酸素	$^{16}\text{O}$ (99.762) $^{17}\text{O}$ (0.038) $^{18}\text{O}$ (0.200)
塩素	$^{35}\text{Cl}$ (75.77) $^{37}\text{Cl}$ (24.23)
鉄	$^{54}\text{Fe}$ (5.8) $^{56}\text{Fe}$ (91.72) $^{57}\text{Fe}$ (2.2) $^{58}\text{Fe}$ (0.28)
銅	$^{63}\text{Cu}$ (69.17) $^{65}\text{Cu}$ (30.83)
臭素	$^{79}\text{Br}$ (50.69) $^{81}\text{Br}$ (49.31)
銀	$^{107}\text{Ag}$ (51.839) $^{109}\text{Ag}$ (48.161)

\* J. Emsley, "The Elements" Third ed. Oxford University Press より

### 1.6 原子量の決定(原子量とモル)

- ・原子量: 原子1つの相対的質量(単位なし)
- ・分子量: 分子の相対的質量(単位なし)  
カニツアロ 水素の分子式  $\text{H}_2$  (原子量の決定に貢献)  
(表1.9参照)

#### ・原子量( $A_r$ )の基準( $^{12}\text{C}$ )

1 mol:  $^{12}\text{C}$ の炭素12 gに含まれる原子の数  
(アボガドロ数  $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ )

1 molの $^{12}\text{C}$ の質量 = 12 g (= 0.012 kg) → 原子量12

$$A_r(M) = (1 \text{ molの} M \text{の質量} / 1 \text{ molの} ^{12}\text{C} \text{の質量}) \times 12$$

原子質量単位(amu) [=  $^{12}\text{C}$ の炭素原子1個の質量の1/12]

$$^{12}\text{C} \text{の炭素原子1個の質量} = 12 \text{ amu} \quad [12 \text{ amu} \times N_A = 12 \text{ g mol}^{-1}]$$

#### ・原子量(分子量- $M_r$ )

同位体が存在するときは, その割合を考慮した平均値が原子量

(例) Agの原子量:  $106.91 \times 0.51839 + 108.90 \times 0.48161 = 107.87$

モル質量(化学式量): 原子(分子)1 molの質量(単位:  $\text{g mol}^{-1}$ ,  $\text{kg mol}^{-1}$ )

特に, イオン性化合物について(第2章)

## 第2章 単位と測定値の扱い

## 2.1 科学で使われる単位(SI単位系)

## ・基本単位

## 表2.1 SI基本物理量とSI基本単位およびその定義(抜粋)

長さ  $l$  (m), 質量  $m$  (kg), 時間  $t$  (s), 電流  $I$  (A), 熱力学温度  $T$  (K)  
物質質量  $n$  (mol), 光度  $I_v$  (cd)

## ・組立単位(誘導単位)

## 表2.2 SI組立単位(抜粋)

組立物理量と記号	SI単位の名称と記号	他のSI単位による表現
力 $F$	ニュートン N	$\text{m kg s}^{-2}$
圧力 $P$	パスカル Pa	$\text{N m}^{-2} = \text{m}^{-1} \text{kg s}^{-2}$
エネルギー $E$	ジュール J	$\text{N m} = \text{m}^2 \text{kg s}^{-2}$
電荷 $Q$	クーロン C	A s
電位, 電圧, 起電力 $\phi, V, E$	ボルト V	$\text{J C}^{-1} = \text{m}^2 \text{kg s}^{-3} \text{A}^{-1}$
セルシウス温度 $\theta, t$	セルシウス度 $^{\circ}\text{C}$	$\theta/^{\circ}\text{C} = T/\text{K} - 273.15$

物理量 = (数値) × (単位) :  $m = 146.0 \text{ kg}$ ,  $m / \text{kg} = 146.0$   
<書体: 物理量は斜体, 単位は立体(ローマン体)>

## ・非SI単位(表2.3)

物理量	単位の名称	単位の記号	SI単位による値
長さ	オングストローム	Å	$1 \times 10^{-10} \text{ m}$
体積	リットル	L または l	$0.001 \text{ m}^3$
圧力	気圧	atm	101 325 Pa
	バール	bar	100 000 Pa
	トル	mmHg または Torr	133.322 Pa
エネルギー	カロリー	cal	4.184 J
	電子ボルト	eV	$1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$

## 2.2 基本物理定数(表2.4)

物理量	物理量の記号	数値	単位
アボガドロ定数	$N_A$	$6.0221 \times 10^{23}$	$\text{mol}^{-1}$
真空中の光速	$c_0$	299 792 458	$\text{m s}^{-1}$
真空の誘電率	$\epsilon_0$	$8.8542 \times 10^{-12}$	$\text{F m}^{-1}$
電気素量(陽子の電荷)	$e$	$1.6022 \times 10^{-19}$	C
プランク定数	$h$	$6.6261 \times 10^{-34}$	J s
ボルツマン定数	$k$	$1.3807 \times 10^{-23}$	$\text{J K}^{-1}$
気体定数	$R$	8.3145	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
ファラデー定数	$F$	$9.6485 \times 10^4$	$\text{C mol}^{-1}$
電子の静止質量	$m_e$	$9.1094 \times 10^{-31}$	kg
陽子の静止質量	$m_p$	$1.6726 \times 10^{-27}$	kg
中性子の静止質量	$m_n$	$1.6749 \times 10^{-27}$	kg

### 2.3 指数表示と倍数接頭語(表2.5)

- ・指数表示—有効数字と関係
- ・倍数接頭語(表2.5 SI接頭語)

$10^{24}$	yotta	ヨタ	Y	$10^{-1}$	desi	デシ	d
$10^{21}$	zetta	ゼタ	Z	$10^{-2}$	centi	センチ	c
$10^{18}$	exa	エクサ	E	$10^{-3}$	milli	ミリ	m
$10^{15}$	peta	ペタ	P	$10^{-6}$	micro	マイクロ	$\mu$
$10^{12}$	tera	テラ	T	$10^{-9}$	nano	ナノ	n
$10^9$	giga	ギガ	G	$10^{-12}$	pico	ピコ	p
$10^6$	mega	メガ	M	$10^{-15}$	femto	フェムト	f
$10^3$	kiro	キロ	k	$10^{-18}$	atto	アト	a
$10^2$	hecto	ヘクト	h	$10^{-21}$	zepto	ゼプト	z
$10^1$	deca	デカ	da	$10^{-24}$	yocto	ヨクト	y

[ cm, mm, nm - ナノ(n), kg, hPa, Gバイト]

### 2.4 測定値の精密さと有効数字

- ・指数表示—有効数字と関係

### 2.5 測定値を含む計算(有効数字, 有効桁数に注意)

#### 2.5.1 加減算(例:p.17)

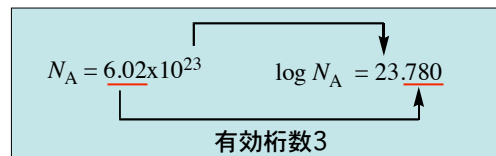
加減算では, 有効数字はその末位が最も高いものに合わせる。

#### 2.5.2 乗除算(例:p.18)

乗除算では, 用いた数値のうち有効桁数が最も小さい数値と同じ有効桁数をもつ。

#### 2.5.3 対数(例:p.19)—特に注意

- ・常用対数:  $\log_{10} x = \log x$ , 自然対数:  $\log_e x = \ln x \rightarrow$  数学と関係
- ・対数の有効数字は小数点以下のみである。



- ・ある真数  $x$  に対して, 自然対数ではその値が常用対数の  $[\log_e 10 = 2.303]$  倍になるが, 有効数字については同様に扱ってよい。(  $e = 2.718$  )

$$\log_{10} x = a, \quad x = 10^a$$

$$\log_e x = \log_e 10^a = a \log_e 10 = 2.303 \cdot a$$