

第1章 化学の基本

1.1~1.4 語句の定義など

原子・質量数・原子番号, 元素・単体・純物質・混合物, 同素体・同位体
巨視的性質・微視的性質, 分子式・組成式, 化学量論・化学量論係数

1.5 原子番号と同位元素

1.6 原子量の決定(原子量とモル)

原子量の基準・**原子量の決定**

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・組立単位, 表2.1・表2.2, (力, 圧力, エネルギー)

物理量の表し方: 物理量 = 数値 × 単位

2.2 基本物理定数

2.3 指数表示と倍数接頭語

2.4 測定値の精密さと有効数字

2.5 測定値を含む計算(有効数字, 有効桁数に注意)

対数(例:p.19)-特に注意

第3章 原子の構造と性質-1

3.1 電子の発見

3.2 核をもつ原子: 原子の構成と体積(α 粒子の散乱実験)

3.3 プロトンの発見

3.4 水素原子から出る光: 水素原子の発光スペクトルと, その表現

3.5 ボーアの水素原子モデル

(1) 定常状態の仮説, (2) 量子仮説, (3) 遷移仮説

$$\frac{m_e v_n^2}{r_n} = \frac{z e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad m_e v_n r_n = \frac{nh}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad \Delta E = E_h - E_l = h\nu$$

○ボーアモデルによる水素原子中の電子エネルギーの計算

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v_n^2 + \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} \right) \quad E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

○水素原子の発光スペクトルとボーアの水素原子モデル

$$\Delta E = h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad [n_2 > n_1]$$

第3章 原子の構造と性質-2

3.6 電子の波動性

・ド・ブロイの物質波

電子も、光が持つ波と粒子の二重性を持つと予言
 (波の性質) $\lambda = h / p = h / mv$ (粒子の性質)

・ボーアの量子化条件の意味

$$m_e v_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad \lambda_n = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v_n}, \quad \therefore m_e v_n = \frac{h}{\lambda_n}$$

$$2\pi r_n = \frac{nh}{m_e v_n} = n\lambda_n \quad (2\pi r_n = n\lambda_n)$$

3.7 不確定性原理(ハイゼンベルグ)

3.8 軌道関数と電子配置-1

・電子の波動関数(軌道関数, 電子軌道)と量子数

量子数の名称: 主量子数・方位量子数・磁気量子数・スピン量子数
 各量子数の値とその意味

・電子が取り得る量子数の組み合わせと軌道関数の名前(表3.1)

第3章 原子の構造と性質-3

3.8 軌道関数と電子配置-2

・電子雲(波動関数の2乗 ψ^2 -電子の存在確率密度)

・電子雲と波動関数の符号(位相) [符号(位相) -化学結合と関係]

軌道関数の符号(位相)と電子雲

・多電子原子の電子配置

電子配置の組立原理

パウリの排他原理とフントの規則

3.9 周期表と元素の分類

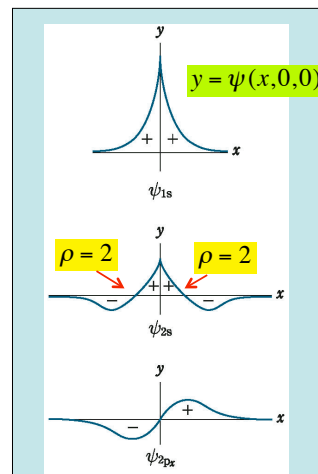
3.10 電子式(価電子の表示)

第5章 いろいろな結晶

5.3 電子配置の安定性

・イオン化エネルギー I

・電子親和力 E_{ea}



第4章 原子から分子へ-1

4.1 ルイスが考えた共有結合

- ・オクテット説
- ・直感的な共有結合の理解
 - 結合性領域と反結合性領域
- ・分子軌道法
 - 結合性軌道と反結合性軌道 (パウリの排他原理とフントの規則)
- ・水素分子イオン(H_2^+)の分子軌道<参考>

4.2 共有結合1:シグマ(σ)結合

- [σ 結合—電子分布が結合軸に関して方向性をもたない(結合軸上)]
- ・水素分子(H_2): ($1s \pm 1s$), 結合性軌道(+, σ_{1s})と反結合性軌道(-, σ_{1s}^*)
 - ・フッ素分子(F_2): ($2p$ 軌道 $\pm 2p$ 軌道) (σ_{2p}^* , σ_{2p})

4.3 分子の形と軌道の混成

- (a) 混成軌道(sp^3 混成軌道)—炭素原子中の電子の軌道 $\Rightarrow CH_4$
- (b) 混成軌道(sp^3 混成軌道)—窒素原子中の電子の軌道 $\Rightarrow NH_3$
- (c) 混成軌道(sp^3 混成軌道)—酸素原子中の電子の軌道 $\Rightarrow H_2O$
- ・中心原子の炭素・窒素・酸素の電子配置はオクテット

第4章 原子から分子へ-2

4.4 共有結合2:パイ(π)結合

- (a) sp^2 混成軌道と π 結合 \Rightarrow 二重結合 (1個の σ 結合と1個の π 結合)
 - ・炭素原子Cの sp^2 混成軌道 [エテン(エチレン) $H_2C=CH_2$ の生成]
 - ・(炭素原子間の) π 結合の形成
 - [π 結合: 2つの $2p$ 軌道が平行に配列されたときにつくられる]
 - (結合軸上でない)
- (b) sp 混成軌道と π 結合 \Rightarrow 三重結合 (1個の σ 結合と2個の π 結合)
 - ・炭素原子Cの sp 混成軌道 [エチン(アセチレン) $HC\equiv CH$ の生成]
 - ・(炭素原子間の) π 結合の形成(2個形成される)

4.5 ベンゼンの構造 (炭素原子Cは sp^2 混成軌道)

- ・Be, B, C原子の混成軌道と, 塩素原子Cl($3s^2 3p^5$)との σ 結合の例

4.6 配位結合

- ・中心原子やイオンの混成軌道と関係する。
- ・配位結合でできた化合物(錯体)は特殊な形をとるものが多い。
- ・銀(I)イオンの錯体: $[Ag(NH_3)_2]^+$, 配位子($:NH_3$)
 - $[Ag^+ (4d^{10}: sp$ 混成軌道, 直線型)

4.7 電子対反発則 (分子の形)

第4章 原子から分子へ-3

4.8 極性分子と原子の電気陰性度

- (a) 無極性結合: 等核二原子分子など ⇒ 無極性分子
- (b) 極性結合: 異核二原子分子など ⇒ 極性分子
 - ・双極子モーメント: 極性分子の分極の程度を定量的に表す。 $\mu = \delta \times r$

(c) 電気陰性度

- ・共有電子対を引きつける傾向を定量的に表す数値
- ・共有結合構造 (cov, A-B) にイオン構造 (A⁺-B⁻) が加味されたと考える。
共鳴エネルギー [Δ_{AB}]
- ・分子間力: 双極子-双極子相互作用など

4.9 分散力 (ファン・デル・ワールス力)

- ・無極性分子間での相互作用: ある瞬間, 瞬間では, 電子分布に偏りが生じている。そのため, 分子間に弱い引力が働く。→ロンドンの分散力

4.10 水素結合

第5章 いろいろな結晶 <参考>

- 5.1 固体の分類, 5.2 イオン結晶, 5.4 金属結合, 5.5 共有結合結晶
- 5.6 半金属と半導体

第6章 分子の世界1; 相図と気体

6.1 相図

- ・相図(状態図): [例] H₂O, CO₂
物質が一定の温度と圧力において, どの相で存在するかを表した図

第7章 分子の世界2; 固体と液体

7.3 溶液と濃度単位

- ・溶質の濃度
- (a) 容量モル濃度 c_i ; (b) 質量モル濃度 m_i ; (c) モル分率 x_i

7.4 溶液の(平衡)蒸気圧とラウールの法則

・ラウールの法則

溶媒Aに不揮発性の溶質Bを少量溶かした溶液の(平衡)蒸気圧

$$P = P_A^0 x_A = P_A^0 (1 - x_B) \quad (x_A \approx 1, x_B \approx 0)$$

- ・理想溶液: ラウールの法則が両成分に適用できる。

7.5 理想溶液の沸点と分別蒸留

- ・(標準)沸点の決定, 沸点: 溶液の平衡蒸気圧 = 外圧

7.6 非理想溶液と共沸混合物

- ・ラウールの法則からの正のずれ, 負のずれ (異分子間相互作用の弱強)

第8章 エネルギーとエントロピー <参考>

(関連事項)

- ・系の内部エネルギー U ・エンタルピー $H = U + PV$ ・エントロピー S
- ・ギブズエネルギー $G = H - TS$
- ・定温および定圧変化: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S = q - T\Delta S$
- 自発変化: $\Delta S + \Delta S_{\text{sur}} = \Delta S - q/T = \Delta S - \Delta H/T > 0$
 $\therefore \Delta H - T\Delta S = \Delta G < 0$
- 平衡条件: $\Delta S - \Delta H/T = 0 \rightarrow \therefore \Delta H - T\Delta S = \Delta G = 0$

第9章 化学平衡の原理-1

9.2 平衡定数 (ここでは主に気相反応を取り扱う) -1

(2) 一般式 $aA(g) + bB(g) \rightleftharpoons qQ(g) + rR(g)$ (9.3)

$$K_p = \frac{P_Q^q P_R^r}{P_A^a P_B^b} \quad (9.4) \quad \text{(反応式での係数に注意)}$$

(4) 平衡定数に関する一般的な注意

(b) 2段階以上からなる反応の平衡定数 (各段階の平衡定数の積)

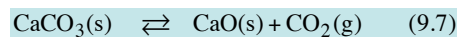
$$K = K_1 K_2 = \frac{P_{\text{NO}}^2}{P_{\text{N}_2} P_{\text{O}_2}} \times \frac{P_{\text{NO}_2}^2}{P_{\text{NO}}^2 P_{\text{O}_2}} = \frac{P_{\text{NO}_2}^2}{P_{\text{N}_2} P_{\text{O}_2}^2}$$

第9章 化学平衡の原理-2

9.2 平衡定数 (ここでは主に気相反応を取り扱う) -2

(5) 2相から成る系や、液相反応での平衡定数

(a) 固相-気相反応



$$K_p = P_{\text{CO}_2}, \quad K_c = [\text{CO}_2] \quad \text{(固体は平衡定数に現れない)}$$

9.3 ギブズエネルギーと平衡定数 (主に気相) (→詳しくは物理化学Ⅲ)

○化学平衡: 系の G が最小 $\rightarrow dG = 0 \rightarrow \Delta G = 0$

$$dG = \sum dn_i \times \bar{G}_i = \sum dn_i \times (\bar{G}_i^0 + RT \ln P_i) = \sum (v_i d\xi) \times (\bar{G}_i^0 + RT \ln P_i)$$

$$= \left[\sum v_i \times (\bar{G}_i^0 + RT \ln P_i) \right] \cdot d\xi = (\Delta G) \cdot d\xi \quad (v_i \text{ の正負に注意})$$

(注意: ΔG は反応進行度が ξ のときの生成物と反応物との差)

$$\Delta G = (q\bar{G}_Q + r\bar{G}_R) - (a\bar{G}_A + b\bar{G}_B) = \sum v_i \times \bar{G}_i \quad \text{(電池とも関連)}$$

$$\Delta G = \sum v_i \times \bar{G}_i = \sum v_i \times (\bar{G}_i^0 + RT \ln P_i)$$

$$= \left(\sum v_i \bar{G}_i^0 \right) + RT \ln \prod P_i^{v_i} = \Delta G^0 + RT \ln \prod P_i^{v_i}$$

$$\text{(化学平衡)} \quad \Delta G = 0, \quad \therefore \Delta G^0 = -RT \ln K_p$$

 ΔG^0 : 標準ギブズエネルギー変化

第10章 酸と塩基-1

10.1 酸と塩基の定義

1)アレニウスの定義 2)ブレンステッド-ローリーの定義 3)ルイスの定義

10.2 水の自己イオン化とpH

・水のイオン積(水の自己プロトシス定数) K_w $K_w = [H_3O^+][OH^-]$

10.3 強い酸と弱い酸—酸解離定数

・酸解離定数: $K_a = K \times [H_2O] = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]}$ $pK_a = \log_{10} \frac{1}{K_a} = -\log_{10} K_a$

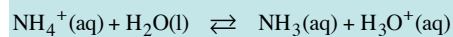
・酢酸(弱酸)水溶液の $[H_3O^+]$ (pH)の求め方(近似解-1, 2)

10.4 強い塩基と弱い塩基

・アンモニア水: 塩基解離定数 K_b と水酸化物イオンの濃度 $[OH^-]$ (近似解-1)

$$K_b = \frac{[NH_4^+][OH^-]}{[NH_3]}, [NH_4^+] = [OH^-], [NH_3] = c_0, \therefore [OH^-] = \sqrt{c_0 K_b}$$

・ブレンステッド酸(NH_4^+)としての酸解離平衡 K_a [共役酸]



$$K_a = \frac{[NH_3][H_3O^+]}{[NH_4^+]} = \frac{[NH_3][H_3O^+][OH^-]}{[NH_4^+][OH^-]} = \frac{K_w}{K_b}$$

弱塩基と
その共役酸

↓
($K_a K_b = K_w$)

第10章 酸と塩基-2

10.5 中和反応と酸塩基滴定

・中和反応(酸塩基反応)と, 滴定曲線の作成

10.6 加水分解と, 弱酸あるいは弱塩基の滴定

・酸あるいは塩基が弱いと当量点は中性ではなくなる→**塩の加水分解**
 ・酢酸(弱酸)を水酸化ナトリウム(強塩基)で滴定したときの滴定曲線
 ・ NH_3 (弱塩基)水溶液をHCl(強酸)水溶液で滴定したときの滴定曲線
 ・加水分解(hydrolysis), **加水分解度** h , 加水分解定数 K_h

10.7 pH指示薬

・pH指示薬: 酸性と塩基性とで色が異なる。(酸塩基滴定での当量点の判定)
 ・肉眼で変色が確認できるとき (**変色域**: $pK_a \pm 1$)

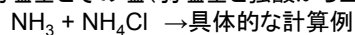
10.8 緩衝溶液

・**緩衝作用**: 外部から酸や塩基が入っても溶液のpHを一定に保つ働き

(1) 弱酸とその塩(弱酸と強塩基から生成した塩)の溶液



(2) 弱塩基とその塩(弱塩基と強酸から生成した塩)の溶液



第11章 酸化と還元

11.1 酸化と還元の定義

11.2 酸化数

11.3 酸化剤, 還元剤の強さの定量化

・電極の電位差=電圧(電池:起電力) ΔE で酸化剤・還元剤の強さを定量化

11.4 標準電極電位

- ・標準水素電極
- ・25 °Cでの, この還元反応(酸化反応)の電位を $E^\circ = 0 \text{ V}$ とし(基準), 他の電極の還元のされ易さ(酸化力の強さ)を数値化する[電極電位-還元電位]
- ・標準水素電極(H_2)の電位を基準(0 V)にしたときの, 半電池反応の還元電位
- ・標準電極電位 E° (還元電位)
- ・電池の構成図(ダイアグラム)の書き方

11.5 標準状態にない電池の起電力:ネルンストの式(濃度平衡定数 K_c の計算)

$$\Delta G = -nF\Delta E$$

$$\Delta G^\circ = -nF\Delta E^\circ$$

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[Q]^q [R]^r \dots}{[A]^a [B]^b \dots}$$

$$\Delta E = \Delta E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln \frac{[Q]^q [R]^r \dots}{[A]^a [B]^b \dots}$$

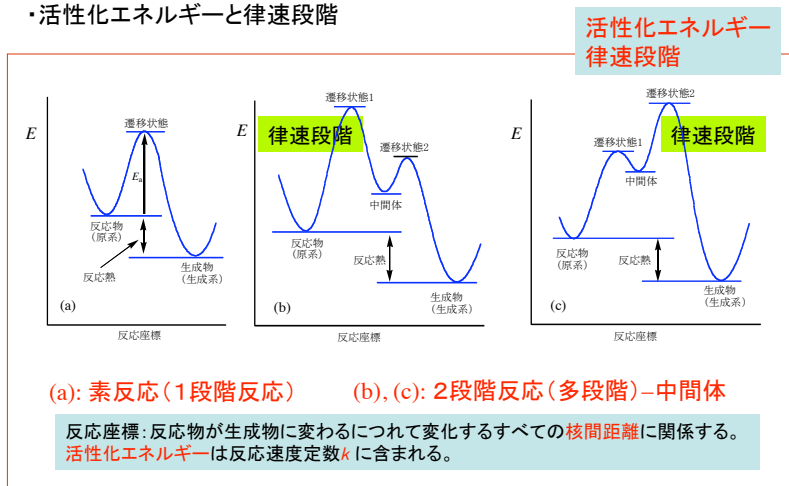
11.6 濃淡電池と溶解度積

・濃淡電池を用いて, 難溶性塩の溶解度積(溶解平衡定数)の決定

第12章 反応の速度-1

12.1 反応のエネルギープロフィール

・活性化エネルギーと律速段階



第12章 反応の速度-2

12.2 反応速度

- ・ 反応速度は時間に依存（反応物の濃度に比例（累乗）、比例定数 k ）

12.3 反応速度式と反応機構

- ・ 反応次数と速度式（微分型、積分型）、一次反応・二次反応
- ・ 反応機構の違いが速度式の違いを生み出している。

$$v = -\frac{d(a-x)}{dt} = \frac{dx}{dt} = k(a-x) \rightarrow \ln \frac{a}{a-x} = kt$$

$$v = -\frac{d(a-x)}{dt} = \frac{dx}{dt} = k(a-x)^2 \rightarrow \frac{1}{a-x} - \frac{1}{a} = kt$$

$$-\frac{1}{a-b} \left(-\ln \frac{a-x}{a} + \ln \frac{b-x}{b} \right) = kt \rightarrow \frac{1}{a-b} \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)} = kt$$

• k : 反応速度定数
(反応の速さを示す)
(E_a を含む)

12.4 速度定数の温度依存性

- ・ アレニウスの式-速度定数の温度依存性と活性化エネルギー

$$k = Ae^{-E_a/RT}$$

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT} \quad (k \text{ は反応の速さを示す})$$