

物理化学の復習

0.1 熱力学

エネルギーの出入りを伴う系内の進行

基本: バルクな物体におけるエネルギーの移動と変換

$$\begin{cases} \text{内部エネルギー} & : U [\text{J}] \\ \text{エントロピー} & : S [\text{J} \cdot \text{K}^{-1}] \end{cases}$$

熱力学第一法則 孤立系 (外部の影響がない) においてエネルギーは一定

試料の温度が ΔT 上昇すると内部エネルギー変化 ΔU は

$$\begin{aligned} \Delta U &= C \Delta T \\ C &= \frac{\Delta U}{\Delta T} \dots \text{熱容量} \end{aligned}$$

圧力一定の系

$$\begin{aligned} H &= U + PV \\ \Delta H &= \Delta U + P \Delta V \end{aligned}$$

エンタルピー変化

P が一定のとき, 系から熱として移動するエネルギー

エネルギーが多くの運動モードに分散されることで拡散が発生

熱力学第二法則 孤立系の内部における自発的变化 (無秩序化)

秩序化 \rightleftharpoons 無秩序化

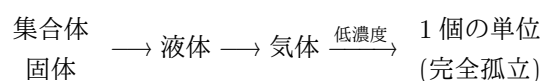
どちらが優先して作用しているのか

平衡状態の偏り

ΔH , $T\Delta S$ の関係

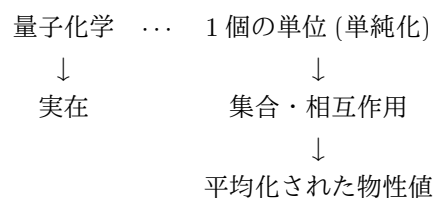
$$\begin{aligned} \Delta G &= \Delta H - T\Delta S \\ &= -RT \ln K \end{aligned}$$

0.2 集合体と分子



1 個の単位 \longrightarrow 化学式で表している状態 \implies 挙動は計算でシミュレートできる。

日常の現象 \longrightarrow 分子間の相互作用を平均化して観察または測定している



量子化される
quantization

量子の世界の挙動
1 個の量子の持つエネルギー
不連続=離散的

分子 1 個 → 分子 1 個 → 原子核 1 個と個々の電子
(量子 → 素粒子)

分子 1 個のもつエネルギー
(ボトムアップ)