

序文

「コンピュータシミュレーションを通じた物理化学」は、物理化学の教科書の補助教材として使用することができるだけでなく、包括的な講義ノートの補助教材としても使用できます。この教科書はほぼ独立した2つのセクションで構成されており、通常、それぞれのセクションは1学期のコースでカバーされます。第1部は化学に一般的に適用される量子力学の一部をカバーし、第2部は熱力学、運動学、およびダイナミクスなどの物理化学の他のトピックをカバーしています。第1部と第2部の間にはほとんどの依存関係がありません。第1部は平均エネルギーが $k_B T$ に等しいと仮定していますが、この仮定は第2部で説明しています。一方、第2部はエネルギーの量子化を仮定しており、これは第1部で説明されています。両方の部分は最小限の説明を提供し、絶対に必要な場合のみ例を示しています。この教科書は現代の教科書としては異例に簡潔ですが、この教科書でカバーされている材料は、学生がアメリカ化学協会 (ACS) の標準的な物理化学試験の準備をするのに十分です。この圧縮を実現するために、この教科書はほとんどの数学の教科書と似たスタイルで書かれています。一般化学、微積分ベースの物理学、ベクトル微積分までの微積分のシーケンス、および線形代数の基本的な知識を修了したすべての人が、この教科書の材料を読み、理解することができるはずですが、これらのコースは多くの大学でこのコースの前提条件として指定されていることが多いため、著者はこれらのコースでカバーされているトピックを詳細に説明する意図はありません。

この教科書の第1部では、化学分野に関連する量子力学を紹介しています。ベクトル空間の基本的な概念を理解することは、量子力学を理解する上で重要です。そのため、この教科書ではそれらの関係が強調されています。第1部の基本的なアウトラインは、古典力学に現代的な要素を加えたものです。これらの要素は、量子力学を介して化学を学ぶために必要な最小限のルールセットであり、これを使って分子の化学を説明しようとしています。第1部全体を通じて、電子間の反発相互作用は計算で完全に無視されていることに注意すべきです。このような相互作用の数値積分には数値解析の基本的な知識が必要であり、ジュニア/シニアの学部レベルの物理化学の授業には適していません。私たちは意図的にこの教科書全体で Dirac のブラケット表記の使用を避けています。

この教科書の第2部は、化学分野に不可欠な熱力学と運動学を紹介しています。直感的な単純さのために、熱力学は微視的なアプローチで紹介されます。ただし、すべての熱力学のトピックが統計熱力学を介して理解しやすいわけではありません。そのため、一部の熱力学も宏観的な方法で紹介しています。この教科書の第2部でカバーされているほとんどの運動学関連のトピックは、単純さのために宏観的なアプローチで紹介されています。第2部の基本的なアウトラインは、ボルツマン分布から始まります。微視的な視点を使用して、いくつかの状態関数と状態方程式を設定し、熱力学の法則を紹介します。その後、化学ポテンシャルの概念を紹介し、それを用いて相対論的な性質と平衡に関するいくつかのトピックを説明します。最後に、反応からより複雑な反応に至るまで、運動学がカバーされています。この教科書でカバーされているこれらのトピックは、典型的な初年次化学で「触れられる」かもしれません。この教科書は直感的に新しいものを追加しないかもしれませんが、読者により厳密な理解を提供することを願っています。

この教材には、物理化学のシーケンスの実験コンポーネントとして使用できるシミュレーション演習も含まれています。これらのシミュレーションの多くは、Mathematica、Excel、および量子力学ソフトウェアなどのソフトウェアを使用しています。これらのシミュレーションのコードは、学生と講師がダウンロードできるようになっています。講師用には、すべての宿題とサンプルの中間試験の解答キーもダウンロードできます。質問がある場合は、お気軽にお問い合わせください。全ての翻訳は AI を使用したので誤字や間違いなどがあれば対応したいので連絡をお願いします。