

授業科目名 (英文名)	エネルギー化学物理 (Molecular Thermodynamics)	科目区分 対象学生	
単位数	2.00	開講年次・ 学期	1, 2年次・前期
担当教員	前田 光治	所属	工学研究科 化学工学専攻
オフィス・場所		連絡先	
講義目的及び到達目標	<p>講義目的 最近, 地球環境, 省エネルギーを配慮した化学プロセスが必要とされるようになった. そのような化学プロセスで取り扱う実際の溶液は, 理想溶液ではなく, 分子, あるいはイオンの特性が反映される複雑な非理想溶液である. エネルギー化学物理では, 化学熱力学, 気体, 溶液の分子レベルでの挙動との関係について理解させる.</p> <p>達成目標 分子レベルの熱力学, 統計熱力学の基礎知識を付けて, 実際の分子シミュレーションにより実在気体のPVT関係を再現できるようにする.</p>		
講義内容・授業計画	<p>科目の位置付け, 教育内容・方法 溶液の自由エネルギーを基点として相平衡関係, 実在の分子性溶液から電解質溶液までの溶液モデル, 状態方程式の最新の発展について講義する. また, 近年発展してきた分子シミュレーションを使って, 液体気体状態式を開発する.</p> <p>1 ヶ月 1. 統計熱力学 2. マクロの熱力学 3. ミクロの熱力学 4. 粒子の分配</p> <p>2 ヶ月 5. 混合過程の確率 6. エントロピーと確率 7. 平衡状態と最大配置 8. ボルツマンの定理</p> <p>3 ヶ月 9. 分子集団 10. 時間平均と空間平均 11. 分子集団と種類 12. 分配関数</p> <p>4 ヶ月 13. 分配関数と熱力学諸量 14. アンサンブル平均 15. 分子動力学による実在気体のシミュレーション</p>		
テキスト	プリント資料を配布		
参考文献	統計熱力学関係の書籍 「シミュレーション物理学」D.W.ハールマン著, 小澤哲他訳, シュプリンガーフェアラーク東京		
成績評価の基準・方法	主要項目についてレポート(演習問題)を課す。レポートで評価する。 S>90%, A>80%, B>70%, C>60%		
履修上の注意・履修要件	物理化学, , 化学熱力学を修得しておくことが望ましい。 新型コロナウイルス感染症に伴う特例措置に基づく遠隔授業 ・当授業は, 原則全ての授業を対面で実施する予定ですが, 履修者人数によっては, 新型コロナウイルス感染症対策として, 履修者を複数の教室に分けて教室間をオンラインで繋ぐ方法や, 対面授業と自宅でのオンライン授業を隔週実施する方法とすることがあり, 自宅等でオンライン授業の受講を視聴できる通信環境(PC・タブレット等の端末やWi-Fi環境)が必要となる場合があります。最終的な授業方法は履修登録後に決定		

	・連絡します。
実践的教育	該当しない
備考	本学の配付資料を参照してください。