

科目名 Course Title	環境物理化学 Physical Chemistry for Environment				
開講期 曜日・時限 Semester Day・Period	前期 First		月曜 Mon.		1限 1st
時間割番号 Course Number	17919	科目区分 Category	環境・エネルギー技術特論 Advanced Subjects on Environmental and Energy Technology		講義形態 Lecture Form 講義 Lecture
担当教員名 Instructor	太田 明雄 OHTA Akio		E-mail :		
対象学生 Assigned Year	M2	適正人数 Class Size	15	単位数 Credit	2
キーワード Keywords	界面・化学熱力学・実験データの取扱・計算機演習 Interface, Chemical thermodynamics, Operation of experimental data, Computer exercise				

◆授業の主題／Topic

実験データを物理化学的に理解するために、界面化学の基礎を理解し、分子軌道法による化学ソフトウェアのスキルを身に付ける。

In order to understand some experimental data from the standpoint of physical chemistry, getting to know the basis of interfacial chemistry and acquire a skill for computational calculation with Gaussian software.

◆授業の目標／Objective

分子集合体はその微小なサイズゆえ非常に多くの表面（界面）有している。よってこれらの系を取り扱う上で非常に重要となる、流体間界面に対する分割面の定義等の熱力学的取り扱いについて講義を行う。また分子集合体系における実験から得られたデータの、熱力学的取り扱いと得られたパラメータの解釈について解説する。更に分子や分子集合体の安定構造や相互作用の考察ができるように、分子軌道計算ソフトを利用した演習を行う

1. Understand the concept of definition of interface.
2. Learn the treatment for physical or chemical phenomena from the standpoint of physical chemistry.
3. Acquire a basic skill for Gaussian software

◆学生の学習目標／Achievements

- ・界面の定義方法についてその概念を理解すること。

- ・界面物性の取り扱いについて学ぶこと。
- ・分子軌道計算ソフトの初歩的なスキルを身につけること。

◆授業の概要／Outline

1. 界面の熱力学と分割面の概念
 2. 界面張力の熱力学的取り扱い
 3. 分子集合体系における実験データの取り扱い
 4. 分子軌道計算ソフトウェア (Gaussian) を用いた演習
1. Thermodynamics for interfacial systems
 2. Introduction of a concept for dividing surface
 3. Thermodynamic treatment of interfacial tension
 4. Management of experimental data from a viewpoint of physical chemistry
 5. Computational exercise of MO calculation with Gaussian software

◆成績評価の方法／Grading Method

試験, レポート, およびプレゼンテーションの内容により行う
Reports (50%) and examination (50%)

◆テキスト・参考書・教材等／Teaching Materials

なし
None

◆その他履修上の注意事項や学習上の助言／Others

前半は講義形式により行う。後半は演習形式により行う。後半の演習では各自ノートパソコンを持参すること。

Members of a class must bring own PC at a computational exercise.

◆オフィスアワー等（学生からの質問への対応方法等）／Consultation Time

原則 e-mail にて受け付ける。
Every time by email

◆履修条件／Prerequisites

なし
None

◆関連科目／Related Courses

なし
None

◆カリキュラムの中の位置づけ（関連科目, 履修条件等）／Relations with the Other Courses in the Curriculum

学類（物質化学類）における物理化学系科目と物理化学実験の履修をしていることが望ましい。
It is desirable to complete an elementary physical chemistry.

◆特記事項／Special note

なし
None