

化学熱力学 II		木曜3限	内容					
回	テーマ	内容	課題番号	内容	出題	提出	返却・講評	備考
【授業のテーマ】								
①状態方程式を用いて純物質及び混合物のPVT計算を行い、実験結果と比較検討する。								
②状態方程式を用いて混合物の気液平衡計算を行い、相図を理解する。								
③溶液の熱力学を理解し、活量係数を求める。								
④反応平衡を、熱力学的に理解し、計算で求める。								
【授業の到達目標】								
化学熱力学 I で学んだ知識を混合物の相平衡、反応平衡に適用することにより、実際に計算し、実用的な結果を得ることを目標とする。								
【授業の概要と方法】								
この講義では、熱力学 I で学んだ自由エネルギーは最少で平衡となるという考えを相分離、溶液の性質や、化学反応に適用し、実用的なレベルで計算できることを体験するため PCを用いて演習を行いながら理論的理解を深める。								
第1回	第1章～第6章:化学熱力学 I の復習	教科書第 I 部(第1章～第6章)から熱力学変数を抽出し、説明する。特に自由エネルギーは最少で平衡となることを述べる。						
第2回	第9章:相律とN_Systemによる気液相PVTの計算	9.1相律、9.2状態方程式のうち純物質および混合物のPVT計算。 N_System: bpred, prpred の使い方 p.80演示(bpredによる純物質PVT計算)。 p.82問9.2-3 混合物PVT計算 混合則の理論的背景:第8章ヒリアル係数 p. 56 8.1, p. 68混合物のヒリアル係数	1	1. 問9.2-2, 2. 問9.2-5, 3. 問 9.2-6 4. 問9.7-4	1			添付CDのN_Systemのインストール法 A1.1～A1.3の演示(p.237-238) 物質コード番号を知るには(p.245)
第3回	9.2 混合物PVTの計算および純物質のPVT計算と実験値との同時比較	p.60 van der Waals式の混合則、 p.71 mij 純物質の性質から混合物の物性が求まる 純物質のPVT計算と実験値との同時比較:問9.2-1 [bcomp 演示]	2	問9.2-15	2	1	1. 演示	
第4回	9.3～9.7 ΔU, ΔH, ΔS, Cp, Cv計算	問9.6-1, 同-2 水のH/S [演示] 問9.7-1 NH <sub>2</sub> のCp [演示]	3			2	1	
第5回	第11章:部分モル量による混合物性の表し方 11.1～11.4	11.1解放系の熱力学、 11.2分モル量、11.3相律の導出。 相平衡のPx図からの理解。 1.4フガシティー係数を求める。			3			2
第6回	11.5 相図	状態方程式を用いたPx図の計算と実験値の比較(bcomp)とてこの原理。 フラッシュ計算と露点沸点計算 混合物のPV図 Tx図 xy図 bpredによるCO <sub>2</sub> +C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> の露点・沸点計算 [演示] bcompによるCO <sub>2</sub> +C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> のフラッシュ計算と実験値との比較 [演示] prcompによるCO <sub>2</sub> +C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> のフラッシュ計算 [演示] (補11.5-1CD)	4	CH <sub>4</sub> +C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> 系のVLE計算	4	3		
第7回	続き: 臨界軌跡, 共沸, 三成分系の気液平衡	臨界軌跡 PT図(等原料組成図) 共沸 三成分系気液平衡の三角線図 超臨界流体抽出					4	3
第8回	第12章:溶解度 12.1, 12-2	12.1 Raoultの法則とHenryの法則 問12.1-1 ゴールシーク法	5	問12.1-3	5			4
第9回	12.3 理想溶液と非理想溶液	12.2 理想溶液 ・活量係数 $\gamma_i$ と活量 $a_i$ ・正則溶液-溶解度パラメータ ・A3.4 ソルバー法による最小二乗法 [演示] ・過剰 Gibbs エネルギー					5	
第10回	12.4 いろいろな活量係数式	・Wilson式による最適活量係数の計算演示。(ソルバー法)	6	問12.4-5.Wilson式による活量係数の計算	6			5
第11回	第13章:反応平衡 13.1～13.3	13.1 反応熱 $\Delta_r H$ 13.2 反応エントロピー $\Delta_r S$ 13.3 起電力	7	1. 問3.1-6 2. 2004年度入試:燃料電池	7		6	
第12回	続き 反応平衡定数 K 13.4	13.4 反応平衡定数の計算	8	問13.4-6	8			7
第13回	続き 平衡反応率 $x_e$	13.4-4 [演示]					8	
第14回	総復習							8 正誤表配布
第15回	試験							

【授業外に行うべき学習活動(準備学習等)】

課題を、適宜科す。1週後、レポートで提出すること。

【テキスト】

化学熱力学 I で用いたと同じ 西海英雄, 吾郷健一, “状態方程式を中心とした 計算熱力学”(分離技術会)を教科書として用いる。

【参考書】

小島和夫、化学技術者のための熱力学、培風館、ムーア 物理化学 東京化学同人、 バーロ 物理化学 東京化学同人

【成績評価基準】

課題レポートと試験により、総合的に評価する。

【学生による授業改善アンケートからの気づき】

授業の理解のため、あるいは発展的な理解を促すため、頻繁にPCを用いて計算し、理解するための課題を出題する。授業内で小さな演習問題(クイズ)を出すこともある。

【情報機器使用】

板書とEXCELを用いた計算演示を行う。