

【授業のテーマ】

- ①熱力学変数とその性質の概要を理解すること。
- ②PVTを状態方程式から出発し、現代物性計算の基礎の対応状態 原理を理解すること。
- ③純物質の飽和蒸気圧を熱力学から理解し、相図を理解すること。

【授業の到達目標】

純物質の熱力学を理解する

【授業の概要と方法】熱力学という大きな学問体系を構成する熱力学変数を紹介し、状態 方程式、および純物質の相平衡について理解する。

【授業】前期 1回は90分 TA 1名

回	タイトル	内容	課題				備考	
			課題番号	内容	出題	提出		返却・講評
1	イントロ A4 単位とその換算	・イントロ(序 授業の進め方) ・p.264 A4.単位とその換算 次元方程式による単位換算時間内演習 力・圧力・重力単位系・エネルギー・仕事量・動力・電力量	1	単位換算	1			
2	第1章 PVTと臨界点 1.1	・1.1 熱力学的世界の用語 ・理想気体の状態方程式、気液相PV図と臨界点						
3	第1章続き 1.2	・1.2 PV図によるPVTの表現 ・臨界点のビデオ [演示] ・フロン混合物の気液平衡、臨界点、三相平衡のビデオ [演示] ・PT図による相平衡の表現 ・臨界点ではなぜ暗くなるのか ・分子シミュレーションによる揺らぎ 【補1.2-2(CD)】 [演示] ・超臨界流体 ・圧縮係数によるPVTの表現	2	空はなぜ青いのか	2	1		
4	4 第7章 van der Waals式と対応状態原理 7.1, 7.2	・van der Waalsとオランダの紹介 ・7.1 van der Waals状態方程式 問7.1-1. ExcelでPV図を描く [演示] ・7.2 二変数対応状態原理 ・ポテンシャルエネルギー	3	対応状態原理の導出とPV図描	3	2	1	
5	5 第7章 続き 7.3, 7.4	・7.3 三変数対応状態原理 — Pitzerの偏心係数 ω ・7.4 Peng-Robinson状態方程式 ・三変数対応状態原理による一般化状態式 ・Dr.Peng, Prof.Robinson の紹介 ・VBA(マクロ)入門 ・問7.4-2で CO2のPVT図をVBAで描く(ただし、VBAの使い方のみ ・課題4 出題。H2OのPVTをPeng-Robinson状態方程式を用いてVBA	4	H2OのPVTをPeng-Robinson状	4	3	2	VBAそのものは言葉で説明するだけでそれ以上は扱わない)
6	6 ゴールシーク法によるPVTの計算(Newton-Raphson法) (学生PC持参)	・付録A3.1 Newton-Raphson法の説明 ・p.255 ゴールシーク法 演示と学生による演習	5	問7.4-6	5	4	3	
7	7 アルゴリズム(計算手順)	・van der Waals式 問7.1-1 ・Peng-Robinson状態方程式 問7.4-2 EXCEL VBA [演示] 問7.4-4 ゴールシーク法による密度の計算 [演示]				5	4	
	第2章 内部エネルギー U 2.1, 2.2	・2.1 理想気体の内部エネルギー ・2.2 仕事と熱力学の第一法則 ・可逆膨張仕事(最大仕事) ・閉じた系の熱力学の第一法則 $dU=dQ-PdV$						

8	第2章 続き 2.3 第3章 HとCp 3.1~3.4 ・2.3 Cv ・状態関数と経路関数 3.1~3.3 ・ Cp-Cv 3.4エンタルピー図	6	Cp-Cv	6	5		
9	第4章 エントロピー S 4.1, 4.2 ・熱力学第二法則 ・全エントロピー変化 ΔS_{total} ・外界のエントロピー変化 ΔS_{sur} ・理想気体等温膨張による ΔS ・蒸発エントロピー	7	ΔS	7	6		
10	第4章 続き 4.3, 4.4 第5章 自由エネルギー 5.1~5.3 ・4.3 理想気体の混合エントロピー ・混合量 ΔM ・熱力学による理想気体の混合エントロピー ・統計力学による理想気体の混合エントロピー ・4.4 熱力学第三法則 ・Helmholtz エネルギー A ・Gibbs エネルギー G	8	ΔS	8	7	6	
11	第6章 熱力学の基本式 6.1 多変数関数と全微分 ・全微分の図形的解釈 ・偏微係数の例 膨張率 Joule-Thomson係数 部分モル量 経路による, よらない 6.2熱力学の基本式 6.3 Maxwellの関係式				8	7	授業内演習
12	第9章 状態方程式を用いた物性計算入門 9.3 理想気体・vander Waals式による ΔU の計算 9.4 理想気体・vander Waals式による ΔH の計算 9.5 理想気体・vander Waals式による ΔS の計算 9.7 状態方程式を用いたCp, Cvの計算					8	
13	第10章 純物質の相平衡計算 10.1 準備 9.1 相律 10.1 Clausius-Clapeyron 式 - 相平衡 ・相平衡の熱力学 ・Clausius-Clapeyron 式による蒸気圧の決定	9	問10.1-2 蒸気圧式の決定 EXC	9			
14	第10章 続き 10.2, 10.3 10.2 Gの性質 ・Gの温度・圧力依存性 10.3 フガシチー ・フガシチーの導入 ・フガシチーによる気液平衡の条件 ・フガシチーの計算 ・液体あるいは固体のフガシチーの計算 ・状態方程式によるフガシチーの計算				9		課題返却は授業外時間に行う
15	試験						

【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。

【成績評価基準】

課題で40%、定期試験の評価で60%の結果を総合して評価する。

【情報機器使用】

課題を解くためには EXCEL を使用することが前提となっている。

【その他】ほぼ毎回レポートを出題し、1 週間後が締め切り。

レポートは、採点して、1 週後に返却する。正解は 授業支援システム(ネットワーク)に掲載。
レポートの 講評は、必要に応じ返却時に行う。