

2024年度
第1クール専門科目

計算化学特論テキスト

岐阜大学大学院 自然科学技術研究科
生命科学・化学専攻
生命工学化学領域 藤澤研究室

藤澤 哲郎

2024年6月4日

目次

第 1 章	表計算ソフトの使い方 (LibreOfficeCalc7.0.5)	1
1.1	LibreOffice とは	1
1.2	四則演算	1
1.3	関数	2
1.4	グラフ作成	5
1.5	便利な機能 (ゴールシーク、ソルバー)	6
1.6	ソルバー (solver)	8
1.7	マクロ	10
第 2 章	物質の状態変化	17
2.1	エネルギーと仕事	17
2.2	理想気体の状態方程式	19
2.3	実在気体	23
2.4	単位の換算	30
第 3 章	熱力学	33
3.1	熱力学第 1 法則	33
3.2	エンタルピーと熱容量	36
3.3	反応熱の温度変化	40
3.4	カルノーサイクル (Carnot cycle)	44
3.5	熱力学第 2 法則	47
3.6	エントロピー	50
3.7	熱力学第 3 法則と自由エネルギー	54
第 4 章	相平衡	61
4.1	液体の蒸気圧	61
4.2	固体の相転移	64
4.3	ギブズの相律	67
4.4	溶液の熱力学	70
4.5	気相-液相間の平衡 (気液平衡)	73
4.6	沸点上昇と凝固点降下	77
4.7	浸透圧	82
第 5 章	化学平衡	87
5.1	質量作用の法則	87
5.2	気相化学平衡	92
5.3	平衡定数の温度変化	96
5.4	遷移状態理論	99
第 6 章	化学反応速度	101
6.1	速度定数	101
6.2	活性化エネルギー	111
6.3	吸着等温式	118
6.4	光化学反応	121
6.5	酵素 (Enzyme)	122
第 7 章	電気化学	129

7.1	電離と電気分解	129
7.2	輸率と解離平衡	134
7.3	緩衝作用と溶解度積	140
7.4	電池の起電力とネルンストの式	148
7.5	濃淡電池と分解電圧	157