

5. 物質・生命化学系 Materials Science and Biotechnology Field			MSB-F3
授業科目名 Course Title	高分子反応工学入門 Introduction to Polymer Reaction Engineering	単位数 Credit	2
担当教員 Instructor	飛田 英孝 TOBITA Hidetaka	開講学期 Semester	秋学期 Fall
キーワード Keywords	重合反応のモデル化、逐次重合、連鎖重合、ラジカル重合、共重合、速度論、分子量分布 Modeling of Polymerization, Step Polymerization, Chain Polymerization, Free-Radical Polymerization, Copolymerization, Kinetics, Molecular Weight Distribution		

授業概要 Course summary
<p>化学工学の一分野として高分子反応工学を取り上げ、素反応論に基づいた重合反応の速度論的取扱い、解析的および確率論的数学モデルの基本的な考え方、分子量分布の概念と活用法、計算機シミュレーションの分子設計への適用法などについて解説します。</p> <p>Basic concepts of "Polymer Reaction Engineering" are elucidated, as a field in chemical engineering. In the course, the following topics are highlighted. (1) Kinetics of polymerization on the basis of the reaction mechanisms and elementary reactions. (2) Analytic and probabilistic models for polymerization reactions. (3) Basic concepts of molecular weight distribution and its applications. (4) Computer simulation for polymer design.</p>
到達目標 Course goal
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 素反応に基づいて、反応速度式や分子量分布式を書き下し、適宜、計算することができる。</li> <li>2. 分子量分布曲線を各種の基準(数/重量基準, 独立変数が分子量/分子量の対数)で描くことができる。</li> <li>3. 数式を使って平均分子量を記述し、算出できる。</li> <li>4. 分子量分布/組成分布と反応操作のかかわりについて説明できる。</li> <li>5. 重合速度、分子量への温度や濃度の影響を説明できる。</li> </ol> <p>By the end of this course, students should be able to:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. formulate/calculate various reaction rates and molecular weight distribution, for a given set of elementary reactions.</li> <li>2. draw various styles of molecular weight distribution profiles (number/weight basis, independent variable with the logarithmic scale, etc.)</li> <li>3. formulate/calculate the average molecular weights.</li> <li>4. elucidate the effects of reactor operation on the molecular weight distribution and copolymer composition distribution.</li> <li>5. elucidate the effects of temperature and concentration on the polymerization rate and the molecular weight.</li> </ol>
授業内容 Course description
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 高分子反応工学とは Polymer Reaction Engineering: Introduction</li> <li>2. 逐次重合の速度論 Kinetics of Step Polymerization</li> <li>3. 逐次重合の反応操作, 分子量分布の概念 Reactor Operations of Step Polymerization, Concept of Molecular Weight Distribution (MWD)</li> <li>4. 数・重量基準の分子量分布 Number- and Weight-Based MWD</li> <li>5. 最確分布, 数・重量平均重合度 Most Probable Distribution, Number- and Weight-Average Chain Length</li> <li>6. 直鎖, 分岐, 架橋高分子とゲル Linear, Branched, Crosslinked Polymers and Gel</li> <li>7. ラジカル重合の素反応論, 開始反応 Elementary Reactions in Free-Radical Polymerization, Initiation</li> </ol>

<p>8. 成長反応 Propagation</p> <p>9. 停止反応, 連鎖移動反応 Termination, Chain Transfer Reactions</p> <p>10. 重合反応速度, 分子量分布—速度論的手法 Polymerization Rate, MWD: Kinetic Approach</p> <p>11. 分子量分布の瞬間値と積算値 Instantaneous and Accumulated MWD</p> <p>12. 分子量分布—確率論的手法 MWD: Probabilistic Approach</p> <p>13. 反応温度の影響, 共重合体組成 (瞬間値) Effect of Temperature, Copolymer Composition (Instantaneous)</p> <p>14. 重合度と組成の2元分布, 共重合体組成の積算値, 共重合体の重合度分布 Bivariate Distribution, Accumulated Copolymer Composition, MWD of Copolymers</p> <p>15. 重合技術 Polymerization Technologies</p> <p>16. 試験 Final Examination</p>
<p>準備学習 (予習・復習) 等 Preparation / Review</p>
<p>事前にテキストを読み、できる限り式の導出を試みておくこと。授業後には、十分に復習を行い、実際に計算やグラフの描画を行い、内容の把握に努めること。週あたり4時間程度の事前・事後学習を想定しています。</p> <p>Read the text before the class, and try to derive the equations therein. Review thoroughly after the class, and try to make actual calculations and draw the figures for better understanding. Approximately 4 hours of study per week for the preparation and review is expected.</p>
<p>授業形式 Class style</p>
<p>講義と演習</p> <p>Lectures and problem solving</p>
<p>成績評価の方法・基準 Method of evaluation</p>
<p>期末試験, 演習レポート</p> <p>Final examination and assignments</p>
<p>教科書・参考書等 Textbook and material</p>
<p>担当教員の執筆した英文テキスト, "Modeling and Simulation of Polymerization", を使用。</p> <p>A course note entitled, "Modeling and Simulation of Polymerization", is used.</p>
<p>受講要件・予備知識 Prerequisite</p>
<p>反応工学と高分子化学の基礎知識</p> <p>Basic knowledge on chemical reaction engineering and polymer chemistry.</p>
<p>その他の注意事項 Note</p>