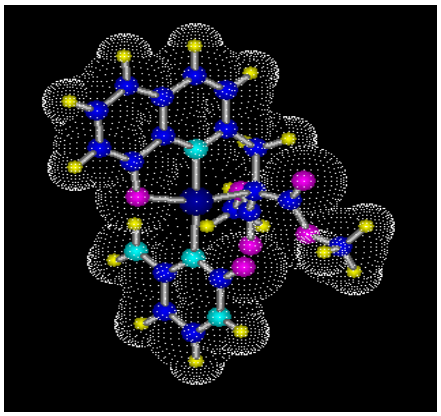
１．個人データ

職名：教授　　氏名：渡辺　昭敬　　学位：博士(理学)　　e-mail： aki1@kobe-kosen.ac.jp

２．教育・研究テーマ

(1) 量子化学計算による分子物性の予測　および　それに関する補正値の計算

ab initio 計算の代表的ソフトウェアである、Gaussian を用いて分子物性（熱的安定性、振動スペクトル、NMR など）を予測する。また、計算値と実験値の誤差を統計処理することにより、各計算における補正値としてのスケール因子を求めている。



(2) 新しい分光装置の開発

・高圧セルを用いた気体吸収スペクトル装置の開発
・溶媒などの自己吸収の少ない蛍光スペクトル測定装置の開発

(3) コーヒーの味覚と色彩の化学的研究

コーヒーの焙煎課程と味、色の関係を酸価滴定、および各種スペクトル測定などを用いて考えていく。

(4) 小中学生向け理科教育教材の開発と実践

小、中学生向けの公開講座の開設や出前実験の開発を通じて、小中学生に理科に興味を持ってもらう。

３．その他のデータ

（１）教育・研究技術相談可能分野

- 化学反応素過程
- 量子化学計算
- 気体スペクトル分析

（２）出前講義・公開講座，講演可能テーマ

・一般化学
・（小、中）理科教育全般

（３）キーワード

・化学、量子化学計算、物理化学