

7.09/2012 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 一名

計一名

質問内容

1. 反応機構と条件が与えられているとき、見掛けの速度定数 k_{obs} を求める問題で、簡単な問題には答えられるが、少し複雑になるとわからない。

回答内容

1. k_{obs} の定義はわかっていた。平衡を含む反応式について学生が自分でできる方法で途中まで解いてもらったが、式を解く上での前提が途中で曖昧になって解けなくなったので、これまでに回答した一般的な方法で解くように勧めた。

k_{obs} を求めるには

- (1) 与えられた反応機構に現れる分子種すべてについて速度式を書く。
- (2) 与えられた条件、平衡や初期条件についての式をすべて書く。
- (3) (1)、(2)で得られた式すべてから A 以外を消去し、A に関する速度式を求め、見掛けの一次反応(一次以外になる場合もある)速度式の速度定数を k_{obs} とすればよい。

7.11/2012 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 三名 女子 一名

計四名

質問内容

1. (2原子分子の)結合次数と価電子数との間にはどのような関係があるのか。また、結合エネルギー、結合距離との関係は。
2. HF の結合次数はいくらか。
3. 2原子分子の分子軌道の固有エネルギーの計算に出てくる K を計算しなさい、という課題が出されたが、わからないので教えてほしい。
4. テキストの式(10.31)にあるベンゼンの π - 分子軌道の係数を求める課題がでたが、求め方がわからないので教えてほしい。

回答内容

1. 価電子数とは何かを学生に確かめた後、(等核)2 原子分子の分子軌道のエネルギー準位図(図 9.13)と結合次数の定義(式(9.33))に基づき、結合次数が図 9.15 のようになることをみた。学生は価電子数と化学結合の強さに正の相関があるように思っていたようだ。結合次数は分子軌道のエネルギー準位に依存するので、その考えは正しくないが、結合次数には、結合距離と結合エネルギーに対してよい相関関係がみられる、と回答した。
2. s-、p-軌道から形成される HF の結合性、反結合性分子軌道と非結合性軌道について説明し、結合性分子軌道を占める電子数が 2 であることから、結合次数は 1 になる、と回答。
3. 学生の質問に曖昧なところがあったので、適切な回答ではなかったかもしれないが、まず、 K の定義式を確

め、それをテキストの方法(楕円座標を用いる)で確かめればよい、と回答。

$$K = \int 1s_B^* \left(-\frac{1}{r_B} + \frac{1}{R} \right) 1s_A d\mathbf{r} = -\int \frac{1s_B^* 1s_A}{r_B} d\mathbf{r} + \frac{1}{R} \int 1s_B^* 1s_A d\mathbf{r} = -\int \frac{1s_B^* 1s_A}{r_B} d\mathbf{r} + \frac{S}{R}$$

しかし後で考えると、学生の聞きたいところは、上式の右辺第一項を極座標表示で直接計算する方法、つまり次式の関係を極座標表示で確かめることだったと思う。

$$\int \frac{1s_B^* 1s_A}{r_B} d\mathbf{r} = e^{-R} (1 + R)$$

(今後同様の質問があったときのために、極座標表示での上式の計算過程と、楕円座標を用いる方が計算は随分と簡単になるので、楕円座標の体積素片の誘導の仕方をまとめておいた。)

1. 分子軌道の固有エネルギー、固有関数を求める方法を、最も簡単なエチレンで復習し、それをブタジエンやベンゼンに適用して永年方程式を書く際の考え方(ヒュッケル近似)を説明した。そのあと、ベンゼンについて 6 行 6 列の行列式の固有値を求めさせ、固有値を代入して、係数を求める連立方程式を解かせた。かなり時間を要したが、質問した学生達は正解を得ることができるようになった。ただ、縮重している軌道では、係数は一義的には決まらないので、戸惑っていた。分子軌道の性質として、分子軌道の値がゼロとなる節や節面の数とエネルギー準位の順番について説明し、ベンゼンの場合、6 つの分子軌道の概形(係数の符号)は容易に描くことができることを示した。

7.13/2012 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 一名 女子 一名 (内一名別時間帯に実施)

四回生 女子 一名
計三名

三回生

1. ベンゼンの π - 分子軌道の係数の求め方がわからないので教えてほしい。
2. 磁気測定についてもっと調べたいので学修支援室にある化学実験講座の本を借り出したい。
前回質問した磁化率の測定については、実験をやり直してほぼ満足な結果が得られた。

四回生

1. 化学工学の演習問題を解いているが、解けない問題について教えてほしい。
 - (1) レイノルズ数の計算
 - (2) アンモニア合成反応の化学量論と平衡に関する計算
 - (3) 高低差のある2つの貯水槽間で、ポンプを用いて水を一方から他方へ移送する問題で、
種々基本的な設問に答えた後、ポンプの理論的稼動効率を計算する問題

回答内容

三回生

1. 7. 1 1 の質問と同じで、同じように係数の求め方を詳しく説明したが、正解を自分で出せるところまでは時間内にできなかった。計算力はある学生なので自分で正解がだせると思う。
2. 質問ではなく、結果の報告的なものであったが、よく調べよく勉強しているとの印象を強くした。

四回生

1. 最初の(1)は簡単な問題であったので、学生のノートの定義式を見ながら、適切な数値を代入すればよい。(2)は化学平衡の問題であるので、そのまま解けばよい。(3)は簡単な設問については物理の基礎知識で解けるが、ポンプの理論的稼動効率についてはノートにも定義式を書きとめていなかったし、化学工学は学生時代に学習しなかったので即答はできない。おそらく式や定義をどこかに書きとめているか、調べればわかるので、その式をベースに解答してはどうか、と回答した。解答できなかったところは後で調べておくことにした。

以上