

7.14/2014 学修相談実施報告

来室学生

四回生 女子 一名

計一名

質問内容

1. 大学院の入試問題（過去問）を解いているが、一部しか解答できない問題があるので見てほしい。具体的には、簡単な2原子分子や有機化合物の化学結合と電子状態、光吸収と発光遷移の選択則、Franck-Condon 遷移（垂直遷移）、蛍光、りん光などに関する設問であった。

回答内容

1. 2原子分子の化学結合と分子軌道はサイモンの物理化学にある図で説明。学生はよく理解していたが、軌道の対称性、特に偶奇性についてよくわかっていなかったので、g-, u-状態の説明をした。分子振動と電子遷移の時間を比べると後者が100倍ほど速いので、電子遷移は基底状態と励起状態間で振動状態が同じところ、すなわち垂直遷移をする、と説明。スピン多重項と偶奇性に関する選択則についても、覚えておくようにいった。

7.16/2014 学修相談実施報告

来室学生

四回生 男子一名 女子 一名

一回生 男子二名

計四名

質問内容

四回生

1. 前回に続いての相談で、大学院の入試問題で解答できない問題があるので見てほしい。具体的には、ラジカル中間体を經由する光化学反応で、光吸収（励起）の条件と反応スキームが与えられていて、定常状態で、生成物の生成速度とその量子収率を求める問題であった。
2. 英文購読の担当部分で和訳の相談にきて、内容は把握できるようになったが、内容の説明をするには、Huggins-Flory の理論や SF 理論をある程度わかっている必要がある。参考書を見たが、SF 理論で高分子吸着の内部エネルギーを簡単なモデルについて求める箇所を見つけたが、その説明がよくわからないので、できれば説明してほしい。

い。

一回生

1. カルノーサイクルの仕事効率を求める問題で、4つの過程について、熱および仕事エネルギーの授受をすべて求めて、解答したいので見てほしい。

回答内容

四回生

1. ラジカル中間体に関わる反応をすべて挙げ、ラジカル中間体に関する速度式を書き、それに定常状態の仮定を適用すると、ラジカル中間体の定常濃度が求められる。この値(式)より、生成物の生成速度が導かれ、また光吸収の光子数(1モルが1アインシュタイン)に対して何モルの生成物が得られるかで、量子収率は求められると、回答。
2. それらの理論について知らないなので、説明ができない。ただ、Huggins-Floryの理論では固体平面上1層の吸着(したがって吸着エネルギーパラメーターは1種類?)であるのに対して、SFではその上にさらに吸着が進行する多層吸着を扱っていて、吸着エネルギーパラメーターも2種以上考えられている。一般論としては、吸着の内部エネルギーとエントロピーを統計力学的に計算すると、両者からヘルムホルツの自由エネルギーが得られるので、それが最小となるところが吸着平衡になっていると考えればよい、と回答。

学生の参考書の図に示されたモデルケースについて、吸着エネルギーの計算をどのようにすれば、参考書の式になるのか、導出できなかった。

一回生

1. カルノーサイクルの4つの過程それぞれについて、 Q 、 W の求め方を説明し、実際に求めた結果を私の資料で示した。熱の出入りだけから仕事効率を求めるのは簡単であるけれど、外部に対してした仕事エネルギーを求め、それに基づき仕事効率を定義し、それが高熱源と低熱源の温度だけで決まることを示すには、断熱過程の $T-V$ の関係を用いる必要があり、学生が少してこずる原因になっていた。

(以上)