

7.12/2016 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 一名

二回生 男子 一名

計二名

質問内容

三回生

1. 学生実験の磁化率測定で得たデータを解析するのに `gnuplot` を用いたいが、使い方が今ひとつわからないので見てほしい。

二回生

1. 授業の課題で、エネルギー分布関数が与えられていて、エネルギーの自乗平均や平均値を求め、これらからエネルギー分布の分散が $\langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2$ で与えられることを示す問題がわからない。

回答内容

三回生

1. 手持ちの `gnuplot` 図を例に示し、重み付きの非線形最小自乗法とエラーバー付きデータプロットに必要な最小限の `gnuplot` コマンドについて説明した。Excel のデータを `gnuplot` で読み取り可能なデータファイルに変換する方法は、私が XP のパソコンで行っている方法を説明し、同じ方法を相談室のパソコン Windows10 で試みたがうまくデータファイルに変換できなかった。学生がたまたまセーブしていたデータが読み取り可能であったので、それを用いてカーブフィッティングについて一通りの説明をし、ダウンロードできる `gnuplot` を用いた作図法のマニュアルを見せ、同様のものを参考にすればよい、と回答。作図の完成は学生に任せた。
(後でわかったことですが、Windows7 以降では拡張子を.txt にしてファイルを作成すればよいことがわかりました。コンピュータソフトや OS の更新でたびたび経験することですが、当惑することしきりです。)

二回生

1. 同様の質問はこれまでに何度かあった。ある量についての分布を示す分布関数がわかれば、その量の平均値や冪乗の平均値が得られることを、点数分布を例に最初に話し、平均値からのずれ(シャープな分布 vs. ブロードな分布)の平均値を単純にとるとゼロになってしまうので、ずれの度合い(分散)を見るには(平均値からのずれ)の自乗の平均を求めて比べればよい、それには分布関数を用いた平均の定

義に基づいて計算すればよい、と回答。最後の式を学生自身が納得して誘導できることを確かめた。

7.14/2016 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 一名

二回生 男子 一名

一回生 男子 二名

女子 一名

計五名

質問内容

三回生

1. Gnuplot を用いた重み付き非線形最小自乗法で実験データを解析したが、当てはめる関数の選び方と、関数形の入力の方が確かでないのを見てほしい。

二回生

1. 反応進行度やそれを用いた（気相）反応の自由エネルギー変化の取り扱いがわからない。

一回生

1. 教科書（マクマリー）の問題で、2 つの図を示し、左図には分子が凝縮したもの、右図には分子がお互いに自由に運動している気体状態のようなものが描かれている。左図の状態から右図への状態変化は自然に起こる方向である。このとき ΔG 、 ΔH 、 ΔS の正負を答える、というもの。全くわからないので教えてほしい。
2. 数学の教科書の問題でいくつも質問があったが、主なものは
 - (i) $\int_0^{\pi} \sin^4 \vartheta \cos^4 \vartheta d\vartheta$ を求めるとき、 β -関数の定義とは積分範囲が違うが β -関数を用いて答えてもよいか。
 - (ii) 置換積分するとき、積分範囲はどうしたらよいのか。
 - (iii) $\int_0^{\infty} x^7 e^{-x^2} dx$ の積分を求めてほしい。

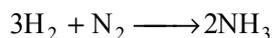
回答内容

三回生

1. 実測データのグラフから、当てはめたい関数の形はおよそ検討がつく。理論的に予想される関数形がわかっているならばそれを用いればよい。学生のデータを見れば、一つは $a/x - bx + c$ のような形、もう一つは $\log(x)$ を含む関数形などが考えられる、と回答。これらの関数形の入力法（乗除の演算やカッコの使い方、対数関数などの関数）の誤りを指摘した後は学生に任せた。一応目的とする結果は得られたようである。

二回生

1. 最初に反応進行度 ξ の定義とその意味を、モル数に変化するアンモニアの生成反応を例に説明した。



定義としては、同じことだが、教科書の定義より「反応したモル数/L を化学量論係数で除す」（アンモニアの反応では： $\xi = \frac{n_{\text{H}_2}^{\circ} - n_{\text{H}_2}}{\nu_{\text{H}_2}} = \dots = \frac{n_{\text{NH}_3}^{\circ} - n_{\text{NH}_3}}{-\nu_{\text{NH}_3}}$ ）の方が分かり易い。単位はモル/L。例えば、最初3モルあった水素が反応して2モルになったときの反応進行度は $\xi = \frac{3-2}{3} = \dots = \frac{0-2/3}{-2} = \frac{1}{3}$ である。この例でわかるように、一つの化学反応について、どの程度反応が進んだかを、反応に関与する出発・生成物質の種類に関わらず一義的に定義できる、と回答。

これ以上は学生の質問が具体的に特定の問題に関してではなかったので、反応進行度と自由エネルギー変化の関係を中心に、テキストの章から例題までを読んでわからないところがあればさらに質問するようにいった。

テキストでは（反応による）自由エネルギー変化を $\Delta_r G$ と表記している。学生は下付添え字 r の意味がわからずに困っていたが、反応による自由エネルギー変化であることを強調しているだけで、これまで熱力学で習ってきた自由エネルギー〔変化〕と変わるところはないと説明した。

一回生

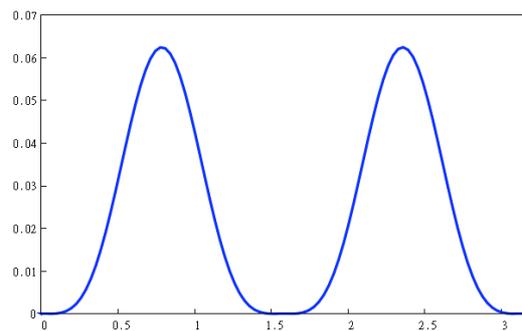
1. 三つの熱力学量変化の内、自然に起こる現象ということから $\Delta G < 0$ 、また分子の存在状態は明らかに乱雑な方向に変化しているので $\Delta S > 0$ と結論できるが、エンタル

ピー変化 ΔH の正負については 2 つの図だけからは判断できない、実際 $\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0$ を満足する ΔH の値は正負に亘ることが出来るので、答えとしては「 ΔH の正負は判断できない」、が正解ではないか、と回答した。

2. (i) 質問の積分が一般的な β -関数の定義式に帰着することをまず示すのがよい。サブノートには三角関数を用いた定義式も与えられているので、それを用いるのは OK. 定義では積分範囲が $[0, \pi/2]$ で、問題の積分では $[0, \pi]$ になっているが被積分関数 $\sin^4 \vartheta \cos^4 \vartheta$ の概形を描いて、関数は $[0, \pi/2]$ と $[\pi/2, \pi]$ で同じ形をしているので〔下図〕、結果を 2 倍すればよい、と回答。

(ii) 置換積分のときの注意点として、積分範囲が変わることを常に考えておかなければならないとし、質問の例でどう変化するかを説明した。

(iii) 質問の積分は置換積分でガンマ関数で表わされることは容易に示せる、と回答。(変数の置換で因子 1/2 が現れるので、結果は 1/2 つまり値としては 3 になることになることを失念していた。)



(以上)