

6.11/2012 学習相談実施報告

来室学生

三回生 男子 三名、女子 一名

二回生 女子 一名

計五名

質問内容

三回生

質問のレベルは学生毎に違ったが、まとめて記します。

1. 「Error bar」や「重み付き」プロット の意味がよくわからない。
2. 前回教えてもらった gnuplot をもう一度 error bar と重みを付してやってみたい。
データは前回と同じ吸光度 vs. 濃度の線形プロットであった。

二回生

1. 物理化学 A(?)で習っているところで、課題として与えられた問題が全然わからないので教えほしい。課題は気相反応 ($\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{NH}_3$) について、その平衡定数を化学ポテンシャル、分圧、全圧、標準圧、反応進行度等で、表わせ、というもので 5 問ほどの設問に分かれていた。

回答内容

三回生

1. Error bar の意味と、図にプロットする際の書き方について簡単に説明。重みについては、「重み」の付し方にも色々あるが、簡単にはその測定点を、他の測定点に比べて何倍重要と考えるかという事で、たとえば同じ値の測定点を 2 つ用いると、その測定点は他の 2 倍の重みがあるという、と説明。学生は「直線を引くとき、重みの大きい点の側をより近く通る、ということですか？それならよくわかる。」と納得したようであった。(重み付き平均や、残差の和の式に現れる重みで説明した方が、よかったかもしれない。)
2. 学生は自分でデータファイルにした吸光度の実験のデータを用いて、相談室のパソコンを用いて数人で重み付き線形フィッティングを試みていたが、色々試みてもうまく行かなかった。前回うまく行った重みなし、error bar なしのフィッティングですらうまく行かず、図には点が一点だけしか現れなかった。フィッティング範囲を指定する方法をコマンドキーhelp を使って見つけ、x、y のフィッティング範囲を指定することができたため、範囲は指定どおりになったが図には一点しか現れず、結局うまく行かなかった。(後で自分でやってみてわかったことだが、学生のデータファイルの作成が正しく行われていなかった。エクセルのデータシート

をコピーして、ワードに書式を「書式なし」に指定して貼り付け、binary に保存したものをを用いているが、そのやり方が正しく行われていなかった。)

二回生

課題についてどの程度わかるのか尋ねたが、全然わからないということだったので、テキスト(マックアーリー・サイモン)の相当箇所を示しながら、気相平衡反応について、

- (1) 気体分子の化学ポテンシャルの表わし方と、各項の意味。
- (2) 自由エネルギーと化学ポテンシャルの関係。
- (3) 反応による自由エネルギー変化と化学ポテンシャル。
- (4) フガシティーと分圧、標準圧と標準フガシティー。
- (5) 自由エネルギー変化と平衡定数。 $\Delta G^\circ = -RT \ln K$ の誘導と、平衡定数の分圧による表現。
- (6) 反応進行度 ξ の定義と分圧と ξ の関係。
- (7) 平衡定数の ξ と全圧による表現。

等々を説明、ポイントごとの式は $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{NH}_3$ の具体例で自分で誘導できるようにした。

以上の説明で、課題の 7 割程度には答えられるので、残りは自分で解いてみて分からなければまた質問に来るようにいった。

以上