

高校化学クラブにおける機器 (IR, VIS)
の利用 (II 報)

高校化学部・大谷悦久

高校化学クラブにおける機器 (IR, VIS) の利用

(II 報)

高校化学部・大谷悦久

1. 要約

昭和53年度の化学部の活動は以下のようなものであった。

① フェノールフタレインの退色速度定数

フェノールフタレインを pH12~13 程度の緩衝液中に入れて、室温付近で退色速度を測定し速度定数を求めた。反応は一次の形に従い、速度定数は $2.1 \sim 2.3 \times 10^{-1}$ (l/モル・秒) と計算された。

② プラセオ塩のアコ化

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$ のアコ化を可視光で追跡した。 $[\text{Co}(\text{en})_2\text{Cl}_2]^+$ は塩酸中でアコ化が阻害されたが、 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$ は塩酸中でも、また有機溶媒 (エタノール, アセトン) 中でもアコ化の速度に変化はなかった。

③ 樹脂の研究

種々の天然樹脂 (マツ, 桜等) と合成樹脂 (グリプタル樹脂等) の IR 測定を行い構造を調べた。樹脂の IR 測定は、技術的に難しかったが、比較が可能である。

④ フルオレセインの合成

フルオレセインを合成し IR にかけてみた。フェニル基, C=O 等主な吸収が確認された。

⑤ メチルオレンジの合成

メチルオレンジを合成して IR にかけてみた。フェニル基, N-H, C-N 等が確認できた。

⑥ 芳香族炭化水素の π 電子系分子軌道と電子スペクトル

分子軌道法を用いていくつかの分子 (ベンゼン, ナフタレン等) の吸収波長を計算し、実測値と比較した。電卓を用いる程度だが、比較的良い一致を見た。

⑦ フェノールフタレインの活性化エネルギーの測定

フェノールフタレインの速度定数を室温付近で温度をかえて測定し、活性化エネルギーは 9~13 Kcal になることを確認した。

本報告では①~④⑥をのせた。

2. フェノールフタレイン退色反応の反応速度定数の測定

大島義人 (28期, 2年)

フェノールフタレインは、水素イオン濃度によっていくつかの平衡の段階をもつが、そのうち

本実験では、強アルカリによる、フェノールフタレインの退色反応をとり上げ、その反応速度定数を、緩衝溶液と分光光度計を用いて行なった。

赤色のフェノールフタレイン (pp^{2-} と略) は 550nm 付近に強い吸収をもっているが、強アルカリにおける無色のフェノールフタレイン ($pp(OH)^3-$ と略) はその付近での吸収がない。従ってスペクトルの吸収強度によって $[PP^{2-}]$ を測定することができる。一方 $[OH^-]$ は緩衝溶液を用いることによって、ほぼ一定とみなすことができる。

この反応の反応速度は

$$v = \frac{d(pp^{2-})}{dt} = k [pp^{2-}] [OH^-]$$

とかける。 $[OH^-]$ は一定としてこれをとくと

$$\ln [pp^{2-}] = -k [OH^-] t + \text{const}$$

また Lambert-Beer の法則より

$$[pp^{2-}] = KA \quad (A: \text{吸光度})$$

よって $[pp^{2-}]$ の初濃度を $[pp^{2-}]_0$ として代入すると

$$-\ln KA = k [OH^-] t - \ln [pp^{2-}]_0$$

変形して

$$\ln A = -k [OH^-] t + \ln [PP^{2-}]_0 / k$$

従って、吸光度の自然対数と時間との関係はグラフで見ると一次直線になり $[OH^-]$ を pH メーターであらじめ調べておけば、傾きから反応速度定数 k が求まる。

実験では pH 13.00 と 12.78 の 2 つの濃度の緩衝液 (KCl+NaOH) を用い、フェノールフタレインの濃度は 10^{-4}mol/l にした。吸光度を 2 分毎によみとり (図 1)、その自然対数をとって

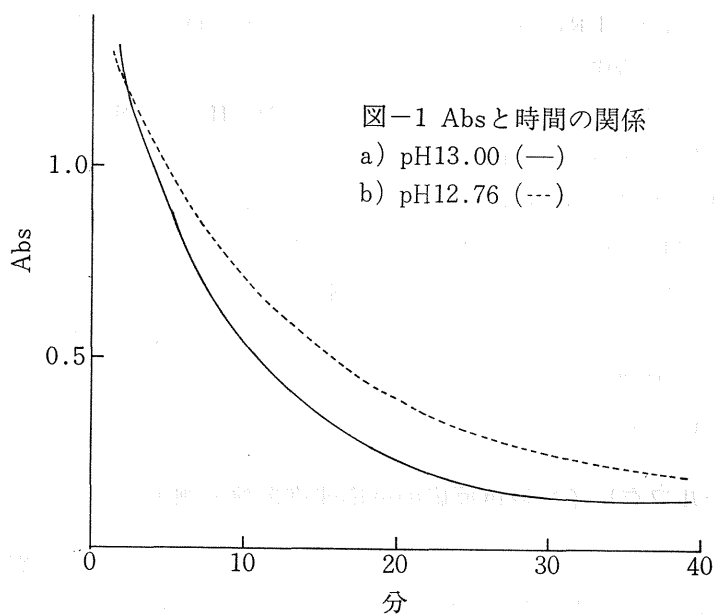


図-1 Absと時間の関係

a) pH13.00 (—)

b) pH12.76 (---)

t との関係グラフにした (図 2)。

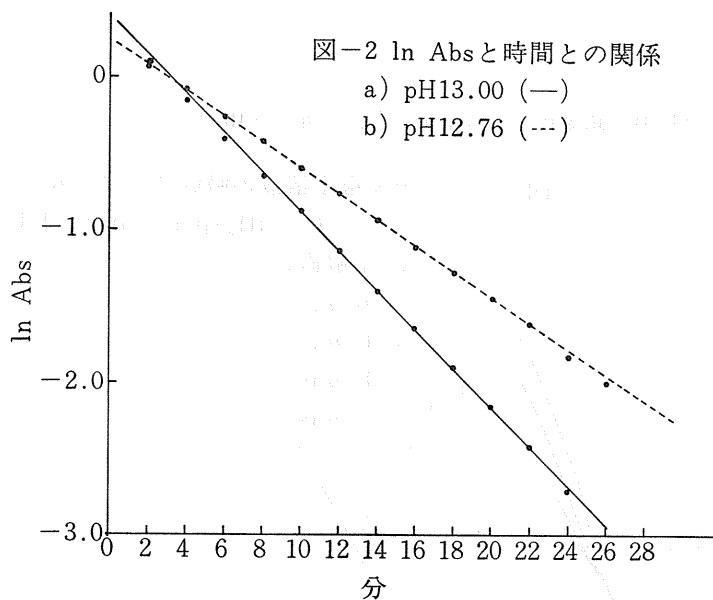
(図 2-a) より pH13.00 の時の傾きは $-0.125/\text{分}$, また pH13.00 より $[\text{OH}^-]$ は 10^{-1} (mol/l)

$$\therefore k = 0.125/10^{-1} \cdot 60 = 2.1 \times 10^{-2} \text{ (l/モル} \cdot \text{秒)}$$

(図 3-b) より pH12.78 の時の傾きは $-0.833/\text{分}$, また pH12.78 より $[\text{OH}^-]$ は $10^{-1.22}$ (mol/l)

$$\therefore k = 0.833/10^{-1.22} \cdot 60 = 3.3 \times 10^{-2} \text{ (l/モル} \cdot \text{秒)}$$

サンプルを 2 種しかとらなかつたため, このつの結果から判断できるとはいいい難いが, 一応 3.3×10^{-2} ぐらいの値になるのではないかという目安にはなるであろう。



3. 錯体の研究プラセオ塩のアコ化

白井, 岳, 藤瀬守正 (28期, 2年)

前年度に研究した $[\text{Co}(\text{en})_2\text{Cl}_2]^+$ に続いて, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$ のアコ化をとりあげた。

アコ化とは, ある種の配位子が水溶液中で中心金属から離れ, かわりに水分子が配位する現象で, 溶液の吸収スペクトルの変化を伴うので分光光度計を用いて, この反応の過程を調べることが可能である。

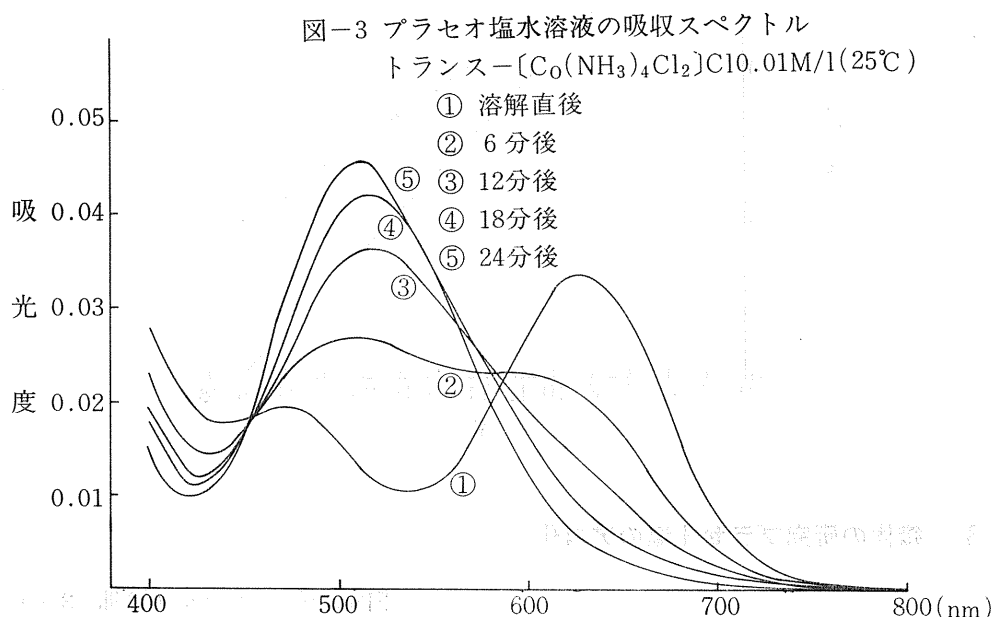
前年度の研究で $[\text{Co}(\text{en})_2\text{Cl}_2]^+$ のアコ化は塩酸酸性中では阻害されることがわかっていたので, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2] \text{Cl}$ について, 塩酸酸性の水と有機溶媒 (エタノール, アセトン) を種々の割合で混合した溶液中における吸収スペクトルの変化を時間とともに追跡し, アコ化の速度を測定した。結果は, これらの物質は, 塩の溶解度には影響したが, アコ化の速度には影響を及ぼさなかつた。従って, アンミン錯体はエチレンジアミン錯体と比較して, $\text{Co}-\text{Cl}$ 間の結合が不

安定であり、アコ化が起りやすい、ということがいえる。
次に $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2] \text{Cl}$ 0.01 モル水溶液の吸収スペクトルを溶解直後から6分ごとに可視領域(800nm~400nm)について測定した。結果は図に示した通りである。溶解から時間がたつにつれて、615nm付近と470nm付近のピークが消え、500nm付近に新しいピークが生じてきている。この後者のピークは、別に作った $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4(\text{OH}_2)_2]^{3+}$ の吸収と一致していること、また第一吸収帯が短波長側へ移動している等の点から、 Cl^- が分光化学系列で上位の配位子、 OH_2 に置きかわり、アコ化が進行したことが考察される。

以上の実験の他、得られた吸収スペクトルの解析からの、反応途中における各物質の濃度決定や、アコ化の進行に伴う遊離塩化物イオンの定量なども試みたが、成果をあげるまでには至らなかった。

(参考)

・実験化学講座⑩ 錯塩化学 日本化学会編 丸善(1972)



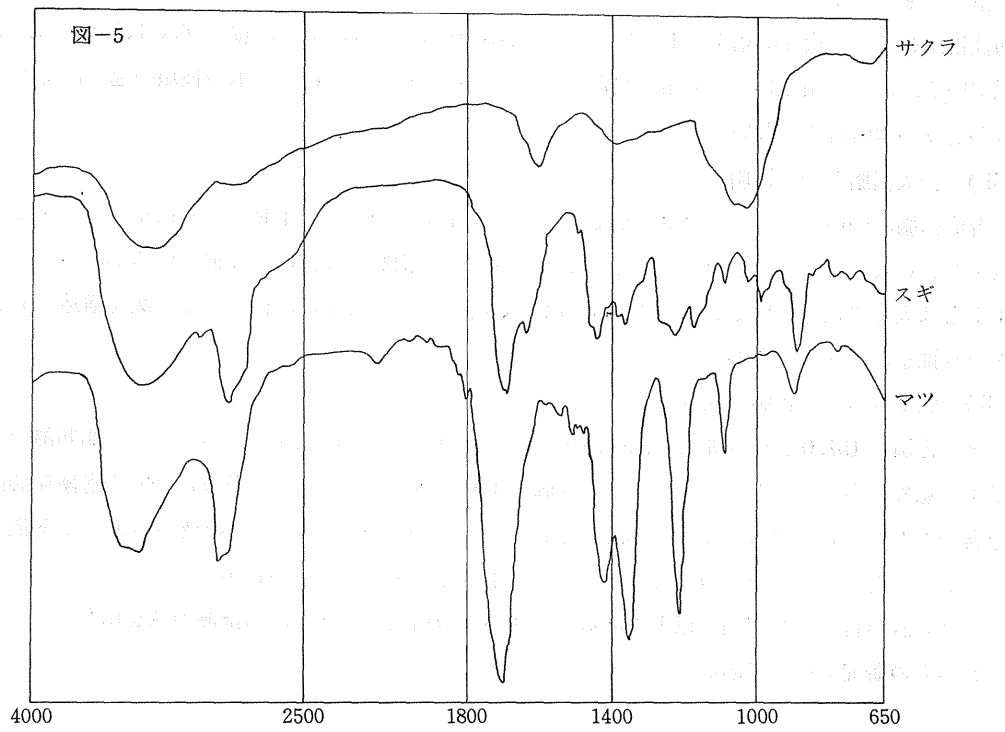
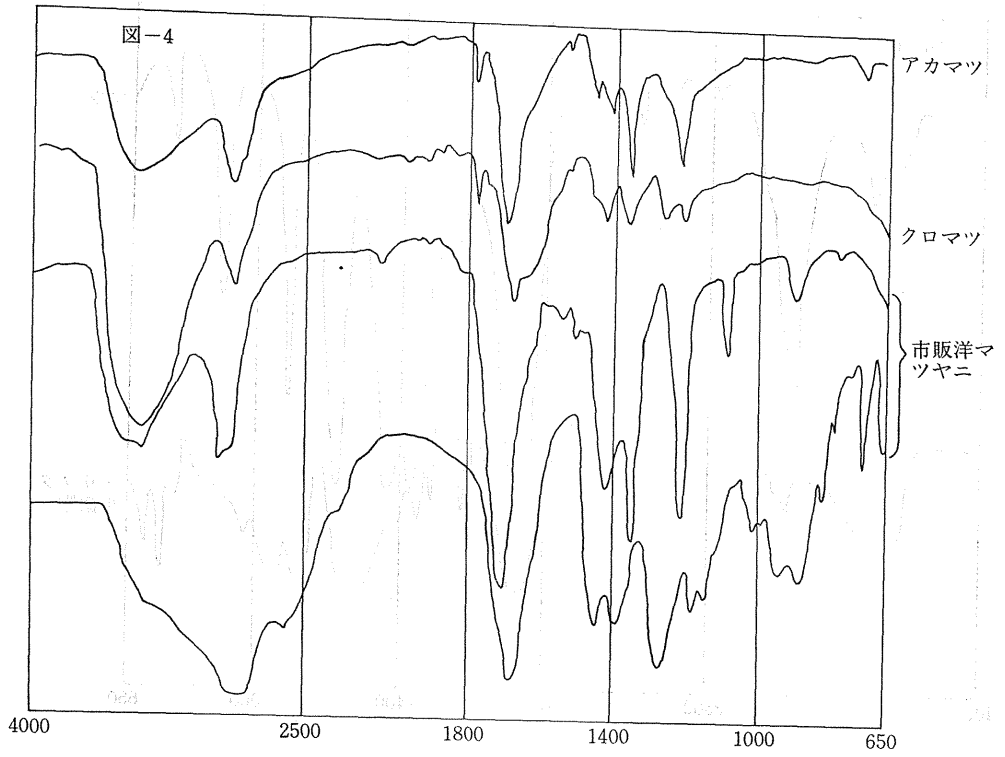
4. 樹脂の研究

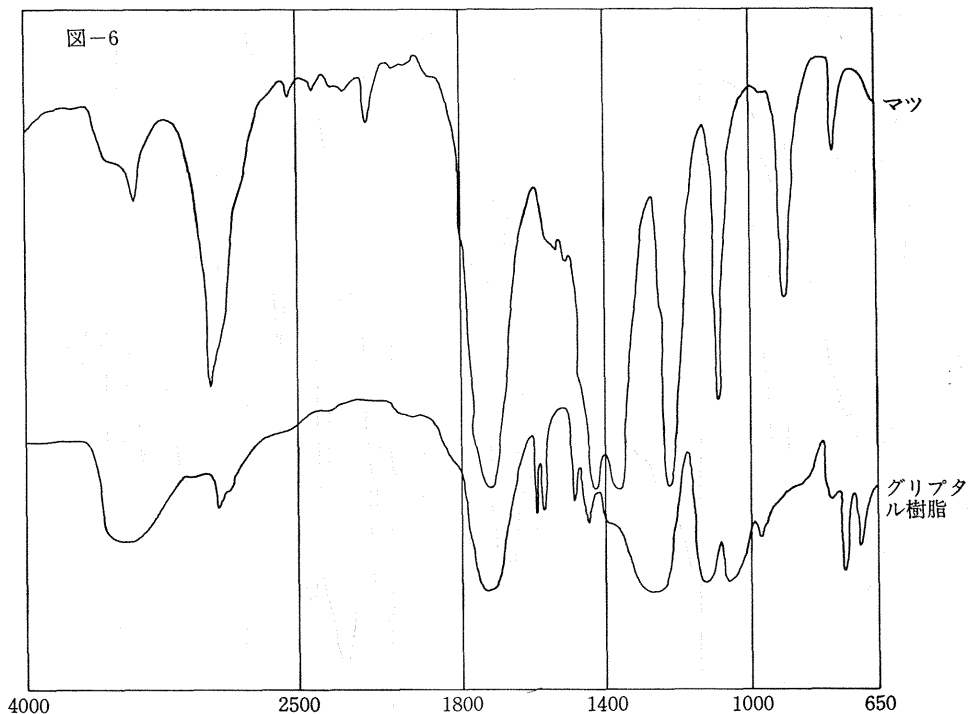
川合弘造・大石雅文(28期, 2年)

樹脂について、以下の実験を行なった。

- (i) 天然樹脂を採取し、IRにかけて組成を考察する。(図-4, 図-5)
- (ii) 合成樹脂を合成し、IRにかけて天然樹脂との比較を試みる。(図-6)
- (iii) 松ヤニについて、ケン化価、酸価を測定し、分子の性質を調べる。

(i) 天然樹脂のIR





市販の準マツヤニ、アカマツヤニ、クロマツヤニはチャートが非常によく似ており、アルカンの性格が強く、三次元的構造をしているように思われる。これに対し、桜とゴムは、互いによく似ているが、マツ類や杉とは非常に異なっている。ただし、この違いが木の種類の違いによるものかどうかは断言できない。

(ii) 合成樹脂と天然樹脂

合成樹脂については、グリプタル樹脂とベークライトについて、IRにより松ヤニとの比較を試みた。これによると、松ヤニのチャートはグリプタル樹脂に非常によく似ているが、ベークライトとは大変異なっている。このことから、(i)で述べたように、松ヤニは三次元構造であるという推察ができそうである。

(iii) 松ヤニのケン化価、酸価

ケン化価は157.0という非常に高い値がでた。このことから、松ヤニが含んでいる脂肪酸の分子量が意外に小さいことがわかる。また酸価は110であった。これは、意外に多くの遊離脂肪酸を含むことを示している。また、蒸留を試みたが、これは枝付フラスコの枝がつまって失敗した。このことから、松ヤニの含むアルコールが不揮発性であることがわかる。

われわれの行なった実験は以上であるが、すべての結論が残念ながら推測の域を出ない。まだこれからの研究テーマである。

5. フルオレッセインの合成

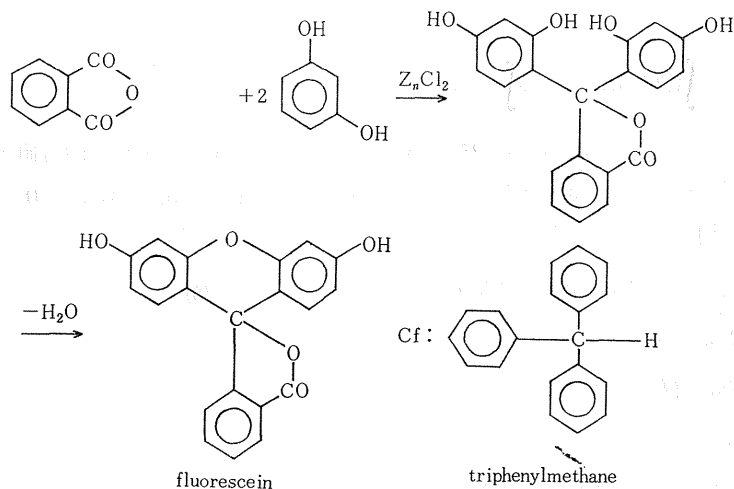
加藤 晃史 (29期, 1年)

フルオレッセインは橙色の結晶で、紫外線にあたると美しい緑色の蛍光を放つ物質である。

操作方法——

- (1) 無水フタル酸10gとレゾルシン15gとを乳鉢でよく混和する。
- (2) 丸底フラスコに上記混合物を入れ、通風室内でマントルヒーターを用い180℃程度まで加熱する。その間絶えずガラス棒でかきまわす。
- (3) 温度が180℃に達したならば、直ちに無水塩化亜鉛の粉末7gを少しずつ添加する。その間もよくかき混ぜる。
- (4) 温度を310℃まで上げ一時間以上加熱すると固化する。
- (5) 放冷後、6N-NaOHを加えて、固体をほぼ完全に溶かす。溶液をろ過し、ろ液に塩酸を加えて酸性にするとフルオレッセインが沈殿する。
- (6) 吸引ろ過し、水洗、乾燥する。

※ 注意：ZnCl₂は極めて吸湿性なので、使用前に熱して完全に無水物としておく。但し、加熱しすぎると融解してしまうので注意する。



フルオレッセインは、トリフェニルメタン系染料である。これら一群の染料(色素)は、あまり丈夫ではないが色調が鮮明であるため、今日でも広く賞用されている。

I R分光の結果、1600, 1500cm⁻¹のところにベンゼン核に特徴的な吸収が見られる。構造式中心付近の-CO-O-については、ν_{C=O}に帰属する吸収が1735cm⁻¹に、ν_{C-O}に帰属する吸収が1300~1050cm⁻¹の間に2本あらわれる。-OHは3500~3000cm⁻¹に巾の広い吸収を示している。

(参考) 基本有機化学合成 岡田 功 梶 産業図書

6. 芳香族炭化水素の π 電子系分子軌道と電子スペクトル

岡本裕己 (27期, 3年)

化合物の電子スペクトルは、量子力学によって、その電子のエネルギー準位により決定することがわかる。ここでは、芳香族炭化水素の π 電子のエネルギー準位を簡単な分子軌道法によって求め、その電子スペクトルとの関連をしらべてみようと思う。

波動力学の基本となるのは、次の Schrödinger 方程式である。

$$H\Psi = E\Psi \quad (1)$$

ここに H はハミルトニアン、 E はエネルギー固有値、 Ψ は系の波動関数である。LCAO法では、分子の波動関数を、その構成原子の波動関数 χ の線型結合で表す。即ち

$$\varphi = \sum_i c_i \chi_i \quad (2)$$

(1) を変形して全空間に渡って積分すれば

$$E = \frac{\int \Psi H \Psi d\tau}{\int \Psi^2 d\tau} \quad (3)$$

これに(2)を代入して整理すると、

$$\frac{\sum_i \sum_j c_i c_j H_{ij}}{\sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs}} = E \quad (4)$$

$$\text{ここに } H_{ij} \equiv \int \chi_i H \chi_j d\tau, \quad S_{ij} \equiv \int \chi_i \chi_j d\tau$$

さて、量子力学では、真の波動関数のエネルギー固有値は、任意の関数の固有値よりも常に小さいか等しい、という変分原理が成立するので、 E の c_i に関する偏微分係数が 0 になるところでエネルギーは極小となり、対応する φ は最も真の波動関数に近くなる。よって

$$\frac{\partial E}{\partial c_i} \sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} + E \sum_i c_i S_{ii} = \sum_i c_i H_{ii} \quad (5)$$

において、 $\partial E / \partial c_i = 0$ とおけば、

$$\sum_i c_i (E S_{ii} - H_{ii}) = 0$$

これを $t=1, 2, \dots, n$ について行なえば、

$$\begin{pmatrix} ES_{11} - H_{11} & ES_{21} - H_{21} & \cdots & ES_{n1} - H_{n1} \\ ES_{12} - H_{12} & ES_{22} - H_{22} & \cdots & ES_{n2} - H_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ ES_{1n} - H_{1n} & ES_{2n} - H_{2n} & \cdots & ES_{nn} - H_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \vec{0} \quad (6)$$

これが有意な解をもつためには、左辺の行列の行列式 = 0 (7) が条件となる。

ここで簡略のため、Hückel 近似を行なう。

- 1) π 電子の軌道のみを取り出して考える。
- 2) $S_{ij} = \delta_{ij}$ (クロネッカーの記号)
- 3) $H_{ij} = 0$ ($i \sim j$ に結合のないとき)

また、計算対称を炭化水素に限るときは、どの炭素原子についても $H_{ij}=\alpha$, $H_{ij}=\beta$ ($i\sim j$ 間に結合のあるとき) という一定の値をとるものとする。そして、(7)式の各成分を β で割り、

$$\frac{\alpha-E}{\beta}=x \text{ とおくと, (7)は次のようになる。}$$

$$\begin{vmatrix} x & k_{21} & \cdots & k_{n1} \\ k_{12} & x & \cdots & k_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{1n} & k_{2n} & \cdots & x \end{vmatrix} = 0 \quad (7')$$

ここで $k_{ij} = \begin{cases} 1 & (i\sim j \text{ に結合があるとき}) \\ 0 & (i\sim j \text{ に結合がないとき}) \end{cases}$

である。(7')の解を λ_m ; $1 \leq m \leq n$ とすれば、

$$E_m = \alpha - \lambda_m \beta \quad (8)$$

の形で表わされることになる。

Wheland は、Hückel の近似 2) を、 $i\sim j$ に結合があるときは $S_{ij}=S$ という 0 でない定数値をもつものとして計算した。この結合は、

$$\frac{\alpha-E}{\beta-ES} = \omega \quad (\beta \neq ES) \quad (9)$$

とすれば、(7')と全く同一の永年方程式の解が ω に等しくなる。よって、この場合のエネルギー固有値は (7') の解 ω_m ; $1 \leq m \leq n$ に対して

$$E_m = \alpha - \frac{\omega_m}{1 - \omega_m S} (\beta - S\alpha) = \alpha - \Omega_m r \quad (10)$$

となる。ここに $r = \beta - S\alpha$, $\Omega_m = \frac{\omega_m}{1 - \omega_m S}$ である。

このようにして分子軌道のエネルギー準位を求めておけば、電子遷移による光吸収がこれによって解釈できる。Hückel 近似では、遷移前のエネルギー準位の λ , 遷移後のエネルギー準位の λ^* に対して、吸収波数 ν が、

$$\nu = 8200 + 22000 (\lambda - \lambda^*) [cm^{-1}] \quad (11)$$

で近似できることが実験的に示された。また Wheland の方法では同様に、

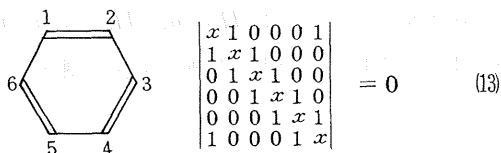
$$\nu = 23000 (\Omega - \Omega^*) [cm^{-1}] \quad (12)$$

で近似できることが実験的に示された。

それではいくつかの炭化水素について分子軌道のエネルギー準位を求めてみる。

1. ベンゼン

ベンゼンの (7') の形の方程式は次のようになる。これをとくと 6 次方程式になるが対称をもつ系の波動関数は、その対称要素に関して対称であるか、反対称であるかのいずれかなので、これを利用すれば、方程式は低次に分割できる。この方程式をとくと、 $x = \pm 1$ (2 重根) $x = \pm 2$



となる。よって Hückel 法のエネルギー E_m は、

$$E_m = \alpha - \lambda_m \beta \quad (8);$$

$$\lambda_1 = -2.00, \lambda_2 = \lambda_3 = -1.00, \lambda_4 = \lambda_5 = 1.00, \lambda_6 = 2.00$$

と表わされる。

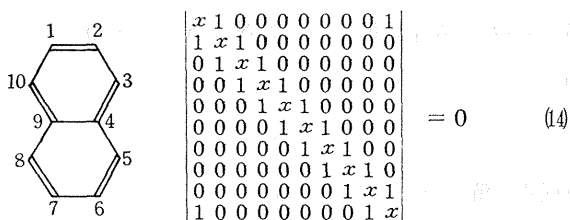
一方 Wheland の方法では、 $S=0.24$ 程度に見つめるのが適当なので、 Ω の値は、 $-1.35, -0.81, 1.32, 3.85$ となる。よってエネルギーは、

$$E_m = \alpha - \Omega_m \lambda \quad (10);$$

$$\Omega_1 = -1.35, \Omega_2 = \Omega_3 = -1.35, \Omega_4 = \Omega_5 = 1.32, \Omega_6 = 3.85$$

と表わされる。

2. ナフタレン



ナフタレンの永年行列式は(14)のようになり、ベンゼンと同様の操作により、次のような λ_m の値を得る。

$$\lambda_1 = -2.30, \lambda_2 = -1.62, \lambda_3 = -1.30, \lambda_4 = -1.00, \lambda_5 = -0.62, \lambda_6 = 0.62, \lambda_7 = 1.00, \lambda_8 = 1.30, \lambda_9 = 1.62, \lambda_{10} = 2.30$$

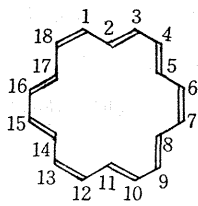
また Ω_m の値は次のようになる。

$$\Omega_1 = -1.48, \Omega_2 = -1.17, \Omega_3 = -0.99, \Omega_4 = -0.81, \Omega_5 = -0.54, \Omega_6 = 0.73, \Omega_7 = 1.32, \Omega_8 = 1.90, \Omega_9 = 2.65, \Omega_{10} = 5.15$$

3. 18-アヌレン

18-アヌレンは、非アセン類であるが芳香族性をもつ物質である。

この行列式は(15)のようになり、



$$\begin{vmatrix}
 x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x
 \end{vmatrix} = 0 \quad (15)$$

次のような λ_m の値を得る。

$$\lambda_1 = -2.00, \lambda_2 = \lambda_3 = -1.88, \lambda_4 = \lambda_5 = -1.53, \lambda_6 = \lambda_7 = -1.00, \lambda_8 = \lambda_9 = -0.35, \lambda_{10} = \lambda_{11} = 0.35 \\
 \lambda_{12} = \lambda_{13} = 1.00, \lambda_{14} = \lambda_{15} = 1.53, \lambda_{16} = \lambda_{17} = 1.88, \lambda_{18} = 2.00$$

また Ω_m は次のようになる。

$$\Omega_1 = -1.35, \Omega_2 = \Omega_3 = -1.30, \Omega_4 = \Omega_5 = -1.12, \Omega_6 = \Omega_7 = -0.81, \Omega_8 = \Omega_9 = -0.32, \Omega_{10} = \\
 \Omega_{11} = 0.38, \Omega_{12} = \Omega_{13} = 1.32, \Omega_{14} = \Omega_{15} = 2.42, \Omega_{16} = \Omega_{17} = 3.42, \Omega_{18} = 3.85$$

これらの結果と(11), (12)式から得られる、基底状態からの電子遷移に基づく吸収波長と、実測の吸収波長とを、次表に並記する。

物質	計算値			実測値 波長 (nm)	log ϵ_{max}
	波長 (nm)	遷移	Hückel Wheland		
ベンゼン	192	205	$E_2, E_3 \rightarrow E_4, E_5$	180	4.7
				204	3.9
				254	2.4
ナフタレン	228	235	$E_5 \rightarrow E_7$	221	5.0
	228	284	$E_4 \rightarrow E_6$	275	4.0
	283	344	$E_5 \rightarrow E_6$	310	2.8
アヌレン	264	266	$E_8, E_9 \rightarrow E_{12}, E_{13}$	278	3.9
	264	367	$E_6, E_7 \rightarrow E_{10}, E_{11}$	369	5.5
	426	622	$E_8, E_9 \rightarrow E_{10}, E_{11}$	408	3.9
			448	4.3	

計算値がかなり実測値に近いものも含まれているように見えるが、次のようなことに気がつく。

i) たとえばナフタレンを考えてみる。Hückelの方法では $E_5 \rightarrow E_6$ が実測の 275 nm に相当すると考えられるが、Whelandの方法ではこれは実測の 310 nm に相当し、実測の 275 nm は $E_4 \rightarrow E_6$ に相当するように考えられる。

i) Hückel の方法では、18-アヌレンの 369 nm の実測値 ($\log \epsilon = 5.5$ と非常に大きい) に相当すると思われる値が計算されてこない。

ii) Wheland の方法での 18-アヌレンの E_8 , $E_9 \rightarrow E_{10}$, E_{11} に基く吸収波長の計算値 (622nm) は非常に誤差が大きい。(実測値の 448 nm に相当するのだろうか?)

iii) 全体的には、Wheland の方法の方がよい数値を与えているようである。

二つの方法共にいろいろと欠点はあるが、この程度の計算で得られた結果としては満足すべきであろう。ここで扱った分子軌道法は最も近似の粗い方法で、よい結果を与えるようなことの方が例外的である。定量的な議論には、CNDO 法、INDO 法、SCF 法などの、近似を高めた分子軌道法を用いなければならない。

参考書

- ・分軌道法入門 広田 穰著 培風館
 - ・量子化学 原田義也著 裳華房
 - ・量子論 小出昭一郎著 裳華房
 - ・入門紫外可視部スペクトル 半田 隆, 相川秀夫著 南江堂
 - ・Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry, L. Pauling, B. Wilson McGraw-Hill 邦訳が白水社から出ている
- スペクトルのデータは次から引用した
- ・実験化学講座 1 「基礎技術」 日本化学会編 丸善
 - ・竹内敬人, 化学, 33, 638 (1978)

7. お わ り に

化学部で機器を積極的に使い出して 3 年目になった。しかし機器は他の種類の機器と組合わせて用いられることが多い。1 台ではすぐに限界がくる。また生徒の活動もせいぜい年間で慣れた頃には受験勉強になる。このような困難はあるがそれでも生徒が日常の勉強と共に、クラブ活動を行っているのはたのもしく思う。成果が生徒に帰っていくことを願っている。

(参考)

筑波大学付属駒場高校化学部研究報告 ('78)

これ以外は各報告中に記した。