

化学反応学 補助資料 2019.06.14

スプレッドシートによるデータ解析

1. A 列に時間 (分単位), B 列に旋光角 α のデータを入力.
2. C1 に=B1*5 と入力. セル右下角のマークをデータの最下行までドラッグ. C2 以下も C1 と同様に B 欄の 5 倍になっていることを確認.

$$\text{マニュアルの式 (1-1): } [\alpha]_D = \frac{100 \cdot \alpha}{l \cdot c}, \quad l = 2 \text{ (dm)}, c = 10 \text{ (g)}$$

3. D1 に=(C1-18.7)/(112.2-18.7) と入力し, 下までドラッグ (以下同様).

$$\text{補助資料 2019.06.07 式 (8)} \quad x_A = \frac{[\alpha]_D - 18.7}{112.2 - 18.7}$$

4. E1 に=1-D1 と入力. $x_B = 1 - x_A$
5. A, D, E 列を選択 (Ctrl キーを押しながらクリック) し, メニューから散布図を選択 → グラフが表示される.
6. α の平衡値 10.55 から, 上と同様の計算により $x_A(\infty)$ を求める. その値を a として, F1 に=LN(D1-a) と入力. (a は具体的な数値)

$$\ln(x_A(t) - x_A(\infty))$$

7. A, F 列を選択し, グラフ表示. グラフから傾きを読み取る (その値を $-k$ とする).

$$\text{補助資料 2019.06.07 式 (5)} \quad \ln(x_A(t) - x_A(\infty)) = \ln(1 - x_A(\infty)) - kt$$

8. G1 に=(1-a)*exp(-k*A1)+a と入力. (a, k は具体的な数値)

$$\text{補助資料 2019.06.07 式 (4)} \quad x_A(t) = (1 - x_A(\infty))e^{-kt} + x_A(\infty)$$

9. H1 に=1-G1 と入力.

10. A, D, E, G, H 列を選択しグラフ表示.

11. 一致が良くない場合には, 8 に戻って k の値を微調整.

得られた a の値から平衡定数 K の値を計算. k の値が速度定数の和 $k = k_f + k_b$ なので, $K = k_f/k_b$ と $k = k_f + k_b$ を連立して k_f と k_b の値を求める.