

## UV スペクトルとコンピュータ活用によって二クロム酸イオンとクロム酸イオンが関与する化学平衡にアプローチする化学教材

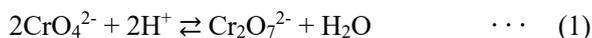
(広島大院人間社会科学) ○須佐 悠仁・網本 貴一

A chemical teaching material for approaching chemical equilibria between dichromate and chromate ions by utilizing UV spectra and computational methods (*Graduate School of Humanities and Social Sciences, Hiroshima University*) ○Yujin Susa, Kiichi Amimoto

The chemical equilibrium between the dichromate and chromate ions depends on pH, and their UV spectra are also altered. A spreadsheet software was used to analyze the speciation of dichromate and chromate ions at each pH using the known equilibrium constants and acid dissociation constants. Furthermore, equilibrium constants for the chemical equilibrium of dichromate-chromate ions were calculated by fitting the simulated absorption spectra to the measured UV spectra.

**Keywords :** *Chemical Education; Chemical Equilibrium; UV-visible Spectroscopy; Computer Applications; Chromium(VI)*

色変化を伴う化学平衡の1つとして、高等学校化学では二クロム酸イオン  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  とクロム酸イオン  $\text{CrO}_4^{2-}$  が関与する化学平衡が取り上げられる。その化学平衡は式(1)で表されるとおり pH に依存して UV スペクトルが変化する (図 1)。



$$K = \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}]}{[\text{CrO}_4^{2-}]^2[\text{H}^+]^2} \quad [\text{L}^3/\text{mol}^3] \quad \cdots (2)$$

本研究では、このような化学平衡を UV スペクトルとコンピュータ活用を通じて解析させる教材化のための検討を行った。

式(2)の平衡定数とクロム酸  $\text{H}_2\text{CrO}_4$  の酸解離定数をもとに、各 pH における  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  と  $\text{CrO}_4^{2-}$  の状態分析 (スペシエーション) を表計算ソフトウェアを用いて解析することで、酸性条件ではクロム酸水素イオン  $\text{HCrO}_4^-$  と  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  が存在し、塩基性条件では  $\text{CrO}_4^{2-}$  が存在すること、そして pH が 5~7 ではこれら 3 種類のイオンが関与する化学平衡となっていることを可視化することができた。次に、各イオンの存在分率に基づいて吸収スペクトルをシミュレートし、実測の UV スペクトルとのフィッティングにより式(2)の平衡定数を算出した。pH が 5.2~7.1 における平衡定数を対数変換した pK 値は pH によっていくらか異なるものの、それらの平均値は -15.4 と算出された。平衡定数の値としては、Smith らの値 -16.32 や Chlistunoff らの値 -13.3~-13.5 が報告されており、それらに相当する結果が得られた。

1) Jack A. Smith, Clyde R. Metz, *Indiana Academy of Science, Chemistry* **1970**, *80*, 159-163.

2) Jerzy B. Chlistunoff, Keith P. Johnston, *J. Phys. Chem. B* **1998**, *102*, 3993-4003.

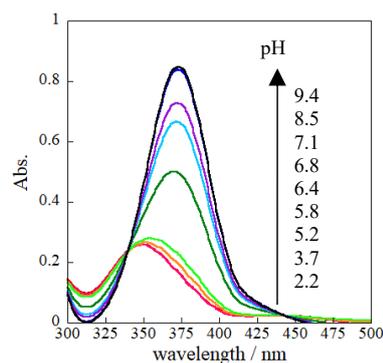


図 1.  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  水溶液の pH 2.2 ~ 9.4 における吸収スペクトル。