光科学 2019年

到達度試験問題 ①

問題1

1. 電磁波
2. 量子
3. 反比例
4. 比例
5. 分子内
6. 原子の振動
7. 分極の変化
8. 分子全体
9. 回転
10. 分極の回転
11. 分子内
12. 原子の振動
13. 分極の変化
14. 永久分極
15. 結合距離
16. 結合角
17. 線形 ◎

$c = h\nu \div$

$\nu \cdot \lambda$

あ. 屈折
い. 散乱
う. 反射
え. 透過
お. 光吸収
か. 発光
き. 位置 ☆
く. 高さ ☆
け. 幅 ☆
こ. 面積 ☆

授業で ぬるP 言ってた

A. $h\nu$

B. $\frac{m_A \times m_B}{m_A + m_B}$

C. $\sqrt{\frac{k}{m_{eff}}}$ (= 振動の角振動数)

D. $3N-5$

E. $3N-6$

F. $\frac{J^2}{2I}$ ($= \frac{1}{2}I\omega^2$)

問題2

(1)

光の強度が電圧出力と比例するため、 $\frac{I}{I_0} = 0.5$

吸収率 $= 100\left(1 - \frac{I}{I_0}\right) = \underline{50\%}$

透過率 $= 100\frac{I}{I_0} = \underline{50\%}$

吸光度 $= -\log_{10}\left(\frac{I}{I_0}\right) \fallingdotseq \underline{0.301}$

吸光係数 $= \frac{0.301(\mathrm{Abs})}{0.2[\mathrm{cm}]} = 1.505 \fallingdotseq \underline{1.51\,[\mathrm{cm}^{-1}]}$

(2)

$0.442 =$ 吸光係数 $\times 0.5[\mathrm{cm}]$

$0.5 \overline{)\,0.442}$ → 0.884, 40, 42

吸光係数 $= 0.884\,[\mathrm{cm}^{-1}]$

$0.884[\mathrm{cm}^{-1}] = 4.42 \times 10^4\,[\mathrm{L/mol \cdot cm}] \times C$(モル濃度)

$C = \frac{0.884}{4.42 \times 10^4} = \underline{2.00 \times 10^{-5}\,(\mathrm{mol/L})}$

・赤外吸収

分子内の原子の振動に伴う分極の変化によって起こる

・マイクロ波吸収

分子全体の回転に伴う分極の回転によって起こる

選択則

分子が永久分極をもつこと

・伸縮振動 → 分子内の結合距離が変化

・変角振動 → 分子内の結合角が変化

・スペクトルの要素 = 位置、高さ、幅

・スペクトルの強度 = 面積

慣性運動	回転運動
位置 x	角度 θ
速度 $v = \frac{dx}{dt}$	角速度 $\omega = \frac{d\theta}{dt}$
質量 m	慣性モーメント $I = mr^2$
運動量 $p = mv$	角運動量 $J = I\omega$
運動エネルギー $\frac{1}{2}mv^2$	運動エネルギー $\frac{1}{2}I\omega^2$
力 F	力のモーメント(トルク) $T = Fr$, $\mathbf{T} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$
運動方程式 $m\frac{d^2x}{dt^2} = \mathbf{F}$, $\frac{dp}{dt} = \mathbf{F}$	運動方程式 $I\frac{d^2\theta}{dt^2} = T$, $\frac{dJ}{dt} = T$

吸光度 $\mathrm{Abs.} = \alpha x = -\log_{10}\left(\frac{I}{I_0}\right)$

透過率 $\%T = 100\frac{I}{I_0}$

吸収率 $\%A = 100\left(1 - \frac{I}{I_0}\right)$

α(吸光係数) cm^{-1} $=$ k(モル吸光係数) $\mathrm{L/mol \cdot cm}$ $\times$ C(モル濃度)

光科学 2019年
到達度試験問題 ②

問題3

(1) 問題文より以下の式が立てられる (←吸収されるので光の強度は減少)

$$\frac{dI(x)}{dx} = -\alpha I(x)$$

(2)

(1)の式を整理すると

$$\frac{dI(x)}{I(x)} = -\alpha dx$$

両辺を積分すると

$$\log(I) - \log(I_0) = -\alpha x$$

$$\log\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\alpha x$$

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\alpha x}$$

$$I = I_0 e^{-\alpha x}$$

(3)

$$I = I_0 10^{-ax}$$

(4)

$\ln(10)a$

(2).(3)より

$$10^{-ax} = e^{-\alpha x}$$

$2\ln(x)$

$2\log x$

$$\ln(10^{-ax}) = -\alpha x$$

$$\alpha = -\frac{1}{x}\ln(10^{-ax})$$

$$= \ln(10^{-ax \times (-\frac{1}{x})})$$

$$= \ln(10)^a$$

問題4

(1)

$$m_{eff} = \frac{1\times 81}{1+81}u = \frac{81}{82}u$$

(2)

$$m_{eff} = \frac{81}{82}u = \frac{81}{82}\times 1.66\times10^{-27}$$

$$= 1.6\cancel{58}\times10^{-27}$$

$$= 1.64\times10^{-27}\ \mathrm{kg}$$

光科学 2019年
到達度試験 ③

(3)

$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m_{eff}}}$

$k = 4\pi^2\nu^2 m_{eff}$

$= 4\pi^2 c^2 \bar{\nu}^2 m_{eff}$

$1m = 100cm$

$1m^{-1} = 0.01cm^{-1}$

(4)

$k = 4\times\pi^2\times(3.00\times10^8)^2\times(2.65\times10^5)^2 \times(1.64\times10^{-27})$

$\frac{m^2}{s^2}\times\frac{1}{m^2}$

$= 409.\cdots$

$\fallingdotseq \underline{409\ (N\cdot m^{-1})}$

(5) 力の定数が変化しない

$^2D^{81}Br$ のとき

$m_{eff} = \frac{2\times81}{2+81}u = \frac{162}{83}u$

$\frac{\bar{\nu}(DBr)}{\bar{\nu}(HBr)} = \frac{\frac{\nu(DBr)}{c}}{\frac{\nu(HBr)}{c}} = \frac{\nu(DBr)}{\nu(HBr)}$

$= \frac{\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m_{eff}(DBr)}}}{\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m_{eff}(HBr)}}}$

$= \sqrt{\frac{m_{eff}(HBr)}{m_{eff}(DBr)}}$

$= \sqrt{\frac{81}{82}u\times\frac{83}{162u}}$

$= \sqrt{\frac{83}{164}}$

$\underline{\bar{\nu}(DBr) = \sqrt{\frac{83}{164}}\,\bar{\nu}(HBr)}$

(6)

$\bar{\nu}(DBr) = \sqrt{\frac{83}{164}}\times2.65\times10^3\ (cm^{-1})$

$= 1885$

$\fallingdotseq \underline{1.89\times10^3 (cm^{-1})}$

(7) 直線分子のため

分子内振動の自由度は $\underline{3N-5}$

角振動数 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m_{eff}}}$

固有振動数 $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m_{eff}}}$

基本振動波数 $\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} \Leftrightarrow \nu = c\bar{\nu}$

$(\nu = f\lambda \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{f}{v})$

分子内振動の自由度 $3N-5$ (直線状分子)

$3N-6$ (それ以外)

光科学 2019年

到達度試験 ④

(8)

$B = \frac{1}{hc} \cdot \frac{\hbar^2}{2I}$

(9)

$I = m_{eff} R^2$

(10)

$F(J) = BJ(J+1)$

(11)

$\Delta F = F(2) - F(1)$

$= 4B - 2B$

$= 2B$

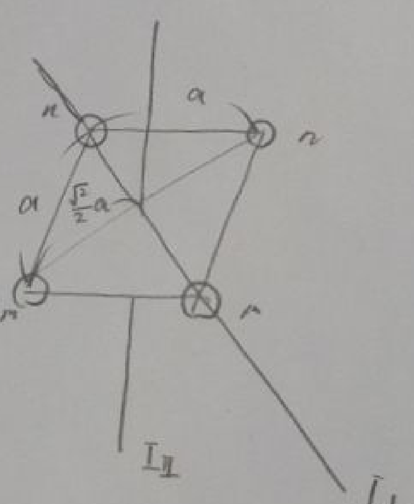
問題7

(1)

$\frac{2}{4}a^2$

$I_{\parallel} = m\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a\right)^2 \times 4$

$= 2ma^2$



(2)

$I_{\perp} = m\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a\right)^2 \cdot 2$

$= 2m\left(\frac{2}{4}a^2\right)$

$= ma^2$

(3)

$A = \frac{1}{hc} \cdot \frac{\hbar^2}{2I_{\parallel}} = \frac{1}{hc} \cdot \frac{\hbar^2}{4ma^2}$

$B = \frac{1}{hc} \cdot \frac{\hbar^2}{2I_{\perp}} = \frac{1}{hc} \cdot \frac{\hbar^2}{2ma^2}$

(4) 扁平こま分子であるため

$F(J,K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2$

$= \frac{1}{hc} \cdot \frac{\hbar^2}{4ma^2}\left\{2J(J+1) - K^2\right\}$

回転項 F(J)

$F(J) = BJ(J+1)$ [cm^{-1}]

回転定数B

$B = \frac{1}{hc} \cdot \frac{\hbar^2}{2I}$

・JとJ−1の項間のエネルギー差ΔF

$\Delta F = F(J) - F(J-1)$

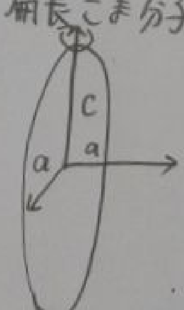
$= 2BJ$

慣性モーメント

$I = mr^2$

対称回転子の項

・扁長こま分子 (c>a)

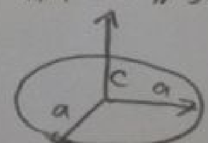


$F(J,K) = BJ(J+1) + (C-B)K^2$ [cm^{-1}]

$A = B > C$

$I_{\perp} = I_a = I_b < I_c = I_{\parallel}$

・扁平こま分子



$F(J,K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2$ [cm^{-1}]

$A > B = C$

$I_{\parallel} = I_a < I_b = I_c = I_{\perp}$