

MS-Word で解答し、PDF に変換してアップロードしてください。

学籍番号	8223036	氏名	栗山 淳
------	---------	----	------

【課題 1】

フェノールの $^{16}\text{O}-^1\text{H}$ 伸縮振動数が 3610 cm^{-1} であるとする。この水素を重水素 ^2D に置換したとき、振動数はどのように変わるか調べなさい。ただし、重水素置換によって力の定数は変わらないとする。

【課題 1 解答欄】(解答の長さは自由です。)

$$\begin{aligned}
 m_{\text{eff}}(\text{OH}) &= \frac{16u \cdot 1u}{16u + 1u} = \frac{16}{17}u \\
 m_{\text{eff}}(\text{OD}) &= \frac{16u \cdot 2u}{16u + 2u} = \frac{32}{18}u \\
 \frac{m_{\text{eff}}(\text{OH})}{m_{\text{eff}}(\text{OD})} &= \frac{\frac{16}{17}u}{\frac{32}{18}u} = 0.52941 \\
 \frac{\nu_{\text{OD}}}{\nu_{\text{OH}}} &= \frac{\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m_{\text{eff}}(\text{OD})}}}{\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m_{\text{eff}}(\text{OH})}}} = \sqrt{\frac{m_{\text{eff}}(\text{OH})}{m_{\text{eff}}(\text{OD})}} = \sqrt{0.52941} = 0.72761
 \end{aligned}$$

振動数と波数は比例するので $\left(\bar{\nu} = \frac{\nu}{c}\right)$

$$\bar{\nu}_{\text{OD}} = 0.72761 \times \bar{\nu}_{\text{OH}} = 0.72761 \times 3610\text{ cm}^{-1} = 2626.7 = \underline{2627\text{ cm}^{-1}}$$

【課題 2】

ハロゲン分子の力の定数 k は次の表のとおりである。また、原子質量単位は $u = 1.661 \times 10^{-27}\text{ kg}$ 、円周率は 3.142 、光速は $2.998 \times 10^8\text{ m/s}$ とする。

- (1) 各々のハロゲン分子の基本振動の波数を求めなさい。
- (2) ハロゲン原子間で比較すると、原子番号が大きいほど力の定数が小さくなる理由を考察しなさい。

	$^{17}\text{F}_2$	$^{35}\text{Cl}_2$	$^{79}\text{Br}_2$
$k\text{ [Nm}^{-1}\text{]}$	445	322	240

【課題 2 解答欄】(解答の長さは自由です。)

$$\bar{\nu} = \frac{\omega}{2\pi c} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{m_{\text{eff}}}} m_{\text{eff}} = \frac{m \times m}{m + m} = \frac{m}{2}$$

2 原子分子において、負の電荷を担う価電子は 2 原子の中間点付近に局在している。正の電荷は

核の近傍に局在していることから、原子半径が大きくなると正と負の電荷の距離が離れ、クーロン力が弱くなると考えられる。

【課題3】

次の分子には基準振動はいくつあるか答えなさい。

(1) H_2O 、(2) H_2O_2 、(3) C_2H_4

【課題3解答欄】(解答の長さは自由です。)

(1) $3N-6=3$

(2) $3N-6=6$

(3) $3N-6=12$

【課題4】

(1) 赤外活性とラマン活性の違いを述べよ。

(2) 分極と分極率の違いを述べよ。

【課題4解答欄】(解答の長さは自由です。)

(1) 赤外活性は分子内の振動の分極が原子の振動によって変化するとき活性なのに対し、

ラマン活性では分子の分極率が原子の振動によって変化することが活性の条件となる。

(2) 分極は外部電場の有無にかかわらず存在できるが、分極率は外部電場によって誘起された分極の変化率である。