

第 12 回 8223036 栗山淳

分子科学課題

問題 I

q_i を各原子の部分電荷, r_i を原子位置とすると電気双極子モーメントは次式で表すことができる

$$\mu = \sum_i q_i \cdot r_i$$

各原子の電荷をクーロン単位に変換すると次のようになる

$$q_O = -0.38 \times 1.602 \times 10^{-19} = 6.0876 \times 10^{-20}$$

$$q_C = 0.45 \times 1.602 \times 10^{-19} = 7.209 \times 10^{-20}$$

$$q_H = 0.18 \times 1.602 \times 10^{-19} = 2.8836 \times 10^{-20}$$

原子位置をメートル単位に変換すると次のようになる

$$r_O = \begin{bmatrix} 0 \\ 118 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot 10^{-12}$$

$$r_C = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot 10^{-12}$$

$$r_{H1} = \begin{bmatrix} -94 \\ -61 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot 10^{-12}$$

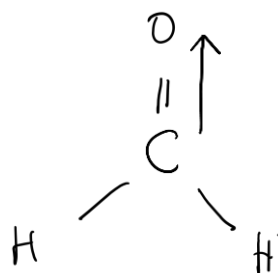
$$r_{H2} = \begin{bmatrix} 94 \\ -61 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot 10^{-12}$$

双極子モーメントは次のようになる

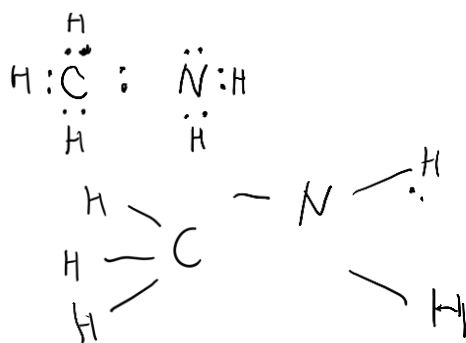
$$\mu = q_O \cdot r_O + q_C \cdot r_C + q_H \cdot r_{H1} + q_H \cdot r_{H2} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1.07 \times 10^{-29} \\ 0 \end{bmatrix} \text{ Cm}$$

双極子モーメントの大きさは $|\mu| = 3.21D$

電子双極子モーメントのベクトルを描くと次のようになる



問題 2



問題 3

誘起双極子モーメントは分極率体積に外部電場の強さをかけてあげると出るので計算すると

$$\mu = 1.48 \times 10^{-25} Cm$$

$$\mu = 44377.81 D$$

問題 4

- (1) 水と油を入れた容器に界面活性剤を入れた時の状態は界面活性剤が水と油の境界面に吸着し、疎水基は油側、親水基は水側に向く配置をとることで界面張力を低下させ、結果として微小な油滴が分散し、エマルジョンを形成する。
- (2) クラフト点
- (3) 臨界ミセル濃度
- (4) 疎水基が水を避け、親水基が水と接触しようとするため、自己組織化が起こる。
- (5) 自己組織化により、親水性の外側に疎水性が内包される構造をとるミセルが形成され、この時の濃度は臨界ミセル濃度と呼ばれる。

問題 5

- (1) 双極子-双極子相互作用とは極性分子間の相互作用で、分子の永久双極子モーメントが互いに引き合ったり反発しあったりする作用のことである。
- (2) 双極子-誘起双極子相互作用とは永久双極子を持つ分子が無極性分子に近づくと、無極性分子の電子雲がわずかに変形し、誘起双極子が生じ、分子間に引力が生じる作用のことである。
- (3) 分散相互作用とは無極性分子間の相互作用で、瞬間的な双極子が誘起され、これが相互作用を生じさせる。

問題 6

- (A) キラル
- (B) エナンチオマー
- (C) アキラル
- (D) 光学

- (E) 逆
- (F) 分散力
- (G) r^{-6}
- (H) 反発力
- (I) パウリ
- (J) 双極子モーメント
- (K) 誘起双極子
- (L) 電子
- (M) 核
- (N) 元に戻る

問題 7

問題 8

ミルクは油滴やたんぱく質などの微小な粒子が水中に分散しているコロイド系であり，この微小な粒子が可視光の全ての波長を等しく散乱する光散乱を引き起こし，白く見えている。

問題 9