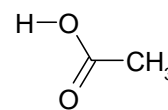


問題 1 酢酸分子の水素結合と双極子モーメントについて以下の問いに答えてください。

- 1) 酢酸分子 (右図) は極性を持つかそれとも無極性か? 理由とともに述べよ。ただし結合 C-O、C=O、O-H の双極子モーメントはそれぞれ 1.2D、1.8D、1.73D であることを用いること。その他の結合のものは無視して良い。



酢酸分子

- 2) 水素結合はどのような原子間に生じる結合か?
- 3) 酢酸分子間には水素結合が生じて、酢酸蒸気中にはある割合で平面型の 2 量体が含まれる。この 2 量体中でどのように水素結合が生じているか予想せよ。
- 4) 酢酸分子と酢酸分子の 2 量体ではどちらが双極子モーメントが大きいと考えられるか?
- 5) 液体の酢酸の比誘電率は 2 量体を含む場合と含まない場合ではどちらが大きくなるか? 理由とともに述べよ。

問題 2 与えられた振動数における化学種 J のモル濃度 [J] に対して、ある濃度範囲では Beer-Lambert の法則が成り立つ。このとき以下の問いに答えてください。

- 1) 1cm のセルを用いて、500nm におけるモル吸収係数が $5.0 \times 10^3 \text{mol}^{-1} \text{cm}^2$ の色素分子の吸光度を測定したところ 500nm での吸光度は 1 であった。この時の色素分子の濃度を求めよ。
- 2) 1) の溶液に同じ濃度で 500nm におけるモル吸収係数が $1.0 \times 10^3 \text{mol}^{-1} \text{cm}^2$ の別の色素分子の溶液を等量加え、体積が倍になるように溶液を調整した。この時の吸光度はいくらになるか? ただし 2 つの色素分子間の反応や相互作用は無視できるものとせよ。

問題 3 分子に光照射を行い電子遷移が起こったあとの過程について述べた以下の文章の①～⑧に適切な言葉を入れよ（またはカッコ内から選べ）。

光照射により励起された分子はまわりの分子と衝突を起し放射を伴わずにエネルギーを失い、電子励起の振動の量子数が①の状態にまで落ちてくる。この励起分子を基底電子状態にまで下ろす際に余分なエネルギーが光として放出されるが、これを②という。また、このため②スペクトルには③状態の振動準位間隔を反映した特有の振動構造が見られる。一方、一重項の基底状態を持っている分子が励起された場合、何らかの機構により、電子スピンの向きが（④：同じ・逆向き）の三重項状態へ⑤を起こすことが可能である。⑤の後に上と同様に衝突によりエネルギーを失って三重項励起状態の量子数が①の状態にまで落ちてくるがこれが基底状態に戻る場合に放出される光を⑥という。しかし、この⑥の放出過程はスピン軌道カップリングによって破られるもののスピン禁制であり非常に（⑦：速く・ゆっくり）と起こるので②は光照射後すぐに消光するのに対して⑥は比較的ゆっくりと減衰してゆく。

① _____、② _____、③ _____、④ _____

⑤ _____、⑥ _____、⑦ _____

問題 4 振動分光に関して以下の問に答えよ。

1) 振動準位間隔は振動の力の定数 k と実効質量 m_{eff} を用いて $\hbar \left(\frac{k}{m_{eff}} \right)^{\frac{1}{2}}$ と表すことができる。HI 分子の

$k = 314 \text{ N/m}$ 、 $m_{eff} = 1.69 \times 10^{-27} \text{ kg}$ を用いて振動準位間隔を波数単位 (cm^{-1}) で計算せよ。

2) 1) で求めた波ほどのような光に相当するか？

3) 二酸化炭素分子の基準振動の個数はいくつあるか？

4) 二酸化炭素の基準振動のうち右下に示す①、②の 2 つの伸縮振動はそれぞれどのようなスペクトル測定により検出されるか？理由とともに述べよ。

