

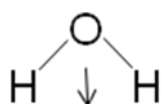
問題 1 表 1 に酸素を含む 3 種の 3 原子分子の部分電荷、結合長および結合角を示す。以下の問いに答えよ。

表 1 酸素を含む 3 原子分子の部分電荷と結合長および結合角

分子	結合長 / pm	結合角 / °	部分電荷 (両端の原子上)
H ₂ O	135	105	0.19
CO ₂	110	180	-0.20
O ₃	110	110	-0.28

① 水分子の永久電気双極子モーメントの向きを図示せよ。

解答 (1 問 7 点)



② 表 1 の分子を永久電気双極子モーメントが大きくなると考えられる順に並べよ。なお必要なら $\cos 52.5^\circ = 0.61$, $\cos 55^\circ = 0.57$ を用いよ。

解答 CO₂ (0) H₂O (135*2*0.19*cos52.5=31.3) O₃ (115*2*0.28*cos55=36.7) の順

③ 極性分子をすべて挙げよ。

解答 μ が 0 でない H₂O、O₃ が該当する。

問題 2 分子間相互作用について以下の問いに答えよ。

① 無極性分子間にも引力相互作用が働くが、これはどのような作用によるものか?

解答 (1 問 7 点)

誘起双極子-誘起双極子間相互作用 (誘起された電荷間のクーロン相互作用)

② ①も含めた閉殻分子同士の相互作用はファンデルワールス相互作用と呼ばれるが、これは分子間距離 r に対してどのような形で依存しているか。

解答 r の 6 乗分の 1 に比例

問題 3 界面の凹の側の圧力 P_{in} と、凸の側の圧力 P_{out} の間には表面張力 γ と界面の曲率半径 r の間には

$P_{in} = P_{out} + \frac{2\gamma}{r}$ の関係があるが、この関係は、液体が内径の小さな管の中を上昇する現象 (毛管現象) に

も適用できる。この圧力差と上昇した液柱が液面に及ぼす圧力が等しくなることを利用して、25°Cにおいて、表面張力 475mN/m 、密度 13.5g/cm^3 の水銀が $r = 0.10\text{mm}$ の毛管中を何 cm 上昇するか計算せ

よ。

解答 (7点)

重力と圧力差が等しいとして計算する。 $\frac{2\gamma}{r} = \rho gh$ より、 $h = \frac{2\gamma}{\rho gr} = \frac{2 \times 0.475}{13.5 \times 10^3 \times 9.8 \times 0.1 \times 10^{-3}} = 0.072m$

従って **7.2cm**

問題4 図1にある化合物のポテンシャルエネルギー図を示す。以下の問いに答えよ。

① この分子の励起状態における振動準位の間隔が $1.3 \times 10^{-20}J$ である時、この分子で測定される紫外可視吸収スペクトルを予想し、図示せよ。ただし、図中にはピークを示す波長をすべて記入するとともに、ピークの強度比にも注意すること。なお、必要なプランク定数 $h=6.63 \times 10^{-34} Js$ 、光速 $c=3.0 \times 10^8 m/s$ を用いよ。

解答 (1問6点)

$E=hc/\lambda$ より 0-0 遷移は 398nm。また、準位間隔は約 15nm

従って、0-1 遷移は 383nm、0-2 遷移は 368nm、0-3 遷移は 353nm となる。また、強度比は重なりのおおきな 0-2 遷移がもっと大きく、0-3、0-1、0-0 の順に小さくなると予想される。従って、右図のようになる。

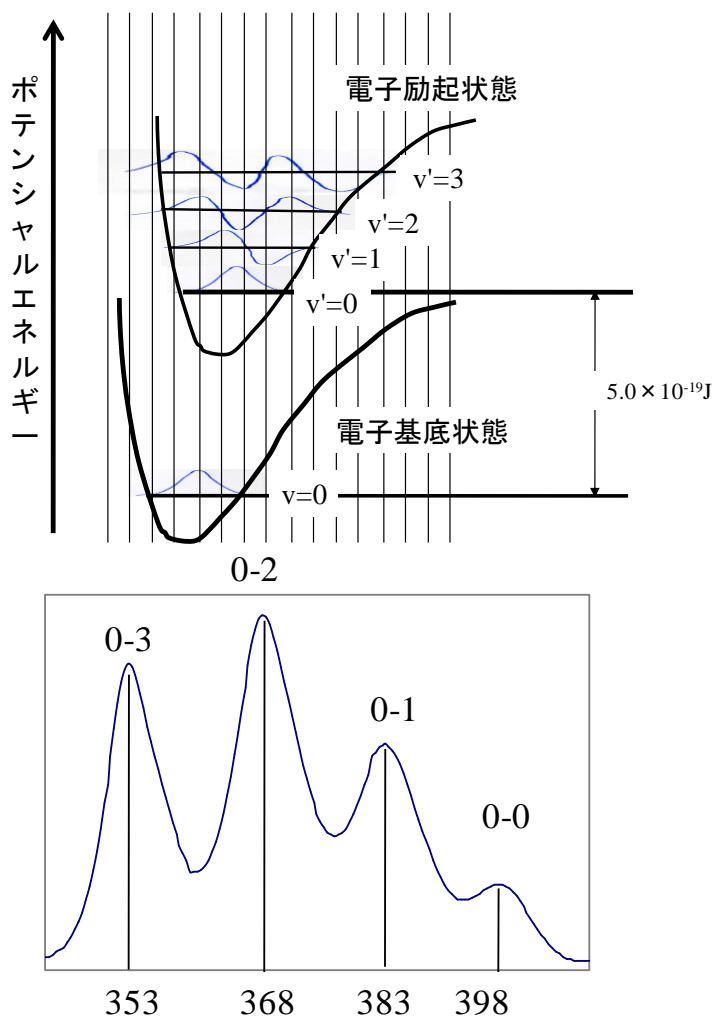
② ①のようにピークの強度比が予想できるのは、電子の遷移が (ア) の原理に基づき (イ) 遷移をするからである。(ア)、(イ) に当てはまる語句を書け。

解答 (ア) : フランク-コンドン、 (イ) : 垂直

③ 1cm の光路長のセルを用いてこの分子を $1.0 \times 10^{-4} mol/L$ に調整した溶液の紫外可視吸収スペクトル測定を行ったところ、極大吸収波長における吸光度が 0.5 であった。この分子の極大吸収波長におけるモル吸収係数を求めよ。

解答 $\epsilon cl=A$ より $\epsilon \times 1.0 \times 10^{-4} \times 1=0.5$ 従って $\epsilon=0.5 \times 10^4 L/cm \cdot mol$ または cm^2/mol

④ ③の計算で用いられる法則は何と呼ばれているか?



解答 ベールーランベルトの法則

問題 5 振動分光に関する以下の文章を読み①～⑧に当てはまる語句を書け。⑨は適当な方を選び、そのように考えた理由を述べること。

振動準位間隔を検出する分光法には①測定と②測定が知られている。この2つの分光法では遷移の選択律が異なり、①測定では③、②測定では④の変化がある振動のみで遷移が可能である。また①測定では⑤光、②測定では⑥光を照射することによって分析がおこなわれる。②測定では照射された光のうち大半はもとと同じ振動数の光が散乱されるが、一部は $v=0$ の準位のものが、 $v=1$ の準位に戻る⑦散乱もしくは $v=1$ の準位の $v=0$ の準位に戻る⑧散乱を受けるため、振動準位間隔に関する情報が得られることになる。

解答 (1問3点)

①赤外吸収、②ラマン分光、③双極子モーメント、④分極率、⑤赤外、⑥可視、⑦ストークス、⑧アンチストークス ⑨解答できないので削除 (全員+4点)