

## レポート問題2

2011. 5. 30

1. 2重結合と単結合が交互に存在する直鎖ポリエン分子の  $\pi$ -軌道の軌道エネルギーを

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8m_e a^2}$$

と近似する。ここで  $n$  は 1, 2... の整数であり、量子化された軌道のエネルギー準位を表す。 $a$  は  $\pi$ -電子の動くことのできる長さで、ポリエン中の CC 結合の数を  $m$  として、 $a = 1.4(m+1) \times 10^{-10}$  m で近似できるとする（両端は、CC 結合長の半分分ずつ余分に伸びているとする）。また、 $m_e$  は電子の質量である。

以下の問に答えよ。

- (1) エチレン ( $\text{CH}_2\text{CH}_2$ ) とブタジエン ( $\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2$ ) の  $\pi$ -軌道に配置されるべき電子の数は幾つか。
- (2) パウリの排他率で一つの軌道には2個までの電子しか配置されない。それぞれ何番目の  $\pi$ -軌道まで電子が配置されるか。
- (3) 光を吸収すると、最もエネルギーの高い  $\pi$ -軌道 (HOMO) の電子が、一つ上の電子の配置されていない  $\pi$ -軌道 (LUMO) に遷移する。そのエネルギー差  $\Delta E$  をそれぞれの分子について求めよ。ただし、電子の質量は  $9.1 \times 10^{-31}$  kg であり、プランク定数は  $6.6 \times 10^{-34}$  Js である。
- (4) この遷移により、それぞれの分子が吸収する光の波長を求めよ。 $\Delta E = h\nu$  の関係式を用いて振動数を出し、波長に変換する。

2. CO 分子の振動を考える。CO 分子については、換算質量  $\mu = 11.4 \times 10^{-27}$  kg、結合距離  $r = 1.13 \times 10^{-10}$  m、結合の力の定数  $k = 18.7 \times 10^2$  N/m が知られている。 $v=0$  と  $v=1$  の二つの状態の間のエネルギー差を J 単位で求めよ。

また、この間の遷移で吸収する光の波長を求めよ。

レポートは A4 の用紙 1 枚にまとめよ。締め切りは 6 月 6 日とする。

## レポート問題2

2011. 5. 30

1. 2重結合と単結合が交互に存在する直鎖ポリエン分子の  $\pi$ -軌道の軌道エネルギーを

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8m_e a^2}$$

と近似する。ここで  $n$  は 1, 2... の整数であり、量子化された軌道のエネルギー準位を表す。 $a$  は  $\pi$ -電子の動くことのできる長さで、ポリエン中の CC 結合の数を  $m$  として、 $a = 1.4(m+1) \times 10^{-10}$  m で近似できるとする（両端は、CC 結合長の半分分ずつ余分に伸びているとする）。また、 $m_e$  は電子の質量である。

以下の間に答えよ。

- (1) エチレン ( $\text{CH}_2\text{CH}_2$ ) とブタジエン ( $\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2$ ) の  $\pi$ -軌道に配置されるべき電子の数は幾つか。
- (2) パウリの排他率で一つの軌道には2個までの電子しか配置されない。それぞれ何番目の  $\pi$ -軌道まで電子が配置されるか。
- (3) 光を吸収すると、最もエネルギーの高い  $\pi$ -軌道 (HOMO) の電子が、一つ上の電子の配置されていない  $\pi$ -軌道 (LUMO) に遷移する。そのエネルギー差  $\Delta E$  をそれぞれの分子について求めよ。ただし、電子の質量は  $9.1 \times 10^{-31}$  kg であり、プランク定数は  $6.6 \times 10^{-34}$  Js である。
- (4) この遷移により、それぞれの分子が吸収する光の波長を求めよ。 $\Delta E = h\nu$  の関係式を用いて振動数を出し、波長に変換する。

2. CO 分子の振動を考える。CO 分子については、換算質量  $\mu = 11.4 \times 10^{-27}$  kg、結合距離  $r = 1.13 \times 10^{-10}$  m、結合の力の定数  $k = 18.7 \times 10^2$  N/m が知られている。 $v=0$  と  $v=1$  の二つの状態の間のエネルギー差を J 単位で求めよ。

また、この間の遷移で吸収する光の波長を求めよ。

レポートは A4 の用紙 1 枚にまとめよ。締め切りは 6 月 6 日とする。