



問題 1. 極性分子と無極性分子

分子の電荷分布が対称的で、負電荷の中心と正電荷の中心が一致する場合、その分子は無極性であると呼ばれる。中心が一致しない場合は極性分子と呼ばれる。

このような電荷分布の偏りは、双極子モーメントという物理量で表される。双極子モーメントは、電荷 q と電荷間の変位 \vec{l} を用いて次のように定義される。

$$\vec{\mu} = q\vec{l}$$

双極子モーメントは正電荷を始点とし、負電荷の方向を向いたベクトルである。



双極子モーメントの単位としてデバイ(D)がよく用いられる。デバイとクーロンメートル(C·m SI単位)の間には次のような関係がある。1 D = 3.33×10^{-30} C·m.

1. 分子の構造と双極子モーメントには密接な関係がある。多原子分子の双極子モーメントは、各結合の双極子モーメントの和として計算できる。この時、各結合はそれぞれ結合モーメントと呼ばれる双極子モーメントを持っていると考える。

非直線三原子分子ABCの場合、双極子モーメントは2つの結合モーメントの和を用いて計算できる。結合ABとBCの結合モーメントをそれぞれ $\vec{\mu}_1$, $\vec{\mu}_2$ とし、結合角を α とする。分子全体の双極子モーメントの大きさを計算するための一般式を示せ。

2. 各結合モーメントの方向を考慮する必要がある。

2.1 CO₂は直線分子である。この分子の双極子モーメントの大きさを計算せよ。

2.2 H₂Sのように、A₂Bという分子式で表される非線形分子は0ではない双極子モーメントをもつ。結合角を $\alpha = 92.0$ 度、SH結合の双極子モーメントを $\mu_{\text{SH}} = 2.61 \times 10^{-30}$ C·mとしたとき、H₂Sの双極子モーメントの大きさ μ を計算せよ。



3. ホルムアルデヒドのHCHの結合角は約120度であることが実験的にわかっている。C-H結合、C-O結合の結合モーメントはそれぞれ $\mu_{\text{C-H}} = 0.4 \text{ D}$ and $\mu_{\text{C=O}} = 2.3 \text{ D}$ である。

3.1 炭素原子と酸素原子それぞれの軌道の混成状態を述べよ。また、ホルムアルデヒド分子における軌道同士の重なりを図で表せ。

3.2 各原子の電気陰性度が $\chi_{\text{O}} > \chi_{\text{C}} > \chi_{\text{H}}$ であることを考慮して、ホルムアルデヒドの双極子モーメント(μ)の大きさをデバイ単位で計算せよ。

(ヒント：電気陰性度は原子が電子を引きつける度合いの強さを表す)

4. 気体状態での水とジメチルエーテルの双極子モーメントは、それぞれ1.84D, 1.29Dである。水分子における2つのO-H結合の結合角は105度であり、ジメチルエーテルにおける2つのO-C結合の結合角は110度である。

メタノールの双極子モーメントが1.69Dであることを考慮して、メタノールのO-H結合とC-O結合の間の結合角を推定せよ。ただし、それぞれの結合の結合モーメントは分子によらず一定であると仮定すること。