1. 次の赤外分光法に関する文章を読み、以下の問いに答えよ.

分子の運動には、分子の重心が移動する [ ア ] 運動、重心のまわりの [ イ ] 運動、平衡構造に対して原子の相対的な配置が変わる振動運動がある。分子が赤外線(光)を吸収すると、分子がより高いエネルギー状態に [ ウ ] され、分子の振動や分子の [ イ ] が変化する。この [ ウ ] に必要な光エネルギーは、分子の化学構造によって異なるため、照射した赤外線の [ エ ] を横軸に、 [ オ ] を縦軸にとることで得られるスペクトルから、分子構造の解析などを行うことができる。また、 [ カ ] の法則を利用して、定量分析を行うこともできる。

赤外線を吸収する分子は、分子の振動モード(基準振動)のうち、双極子モーメントをもつものに限られる. N 原子分子の振動モードの数は、以下のように考えることができる. N 原子分子中の一つ一つの原子に着目すると、これらは x, y, z 方向に運動できるため、一つの原子がもつ自由度は 3 である. したがって、N 原子分子の全体の自由度は 1 キ 1 となる. このうち、原子の相対的な配置が変わらない運動には、分子全体が移動する 1 ア 1 運動と、1 イ 1 する運動であり、1 ア 1 運動の自由度は 1 ク 1 、1 である. したがって、相対的な配置が変わる振動運動の自由度は、直線 1 、1 の数になる.

問1 [ア]~[カ]にあてはまる最も適切な語句を記せ.

問2 [ キ ]~[ シ ]にあてはまる最も適切な数や数式を記せ.

問3 水 H<sub>2</sub>O で観測される振動モード(基準振動)の数はいくつか. また, そのすべて の振動モードを, 以下のキーワードを組み合わせて答えよ.

キーワード:「対称」「変角」「振動」「逆(非)」「伸縮」

## 9. 物理化学

2/2

2. 次の反応速度論に関する文章を読み、以下の問いに答えよ.

ある物質 A が出発物質となり反応が進行するとき、その反応の速度 v は、時間 t とその時の物質 A の濃度 [A] を用いて、式(2.1)の反応速度式(微分方程式)で表すことができる.

$$v = [ \mathcal{T} ] \cdots \cdots (2.1)$$

また、一般に、vと反応物の濃度(ここでは[A])の間には、式(2.2)の関係式が成り立つ.

$$v = k[A]^n \quad \cdots \quad (2.2)$$

ここで、n は反応次数、k は速度定数であり、実験的に求めることができる。k は式(2.3)で表される経験式に従うことが知られている。

$$k = C \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \quad \cdots \qquad (2.3)$$

この式を〔 イ 〕の式といい,C は温度に依存しない定数, $E_a$ は〔 ウ 〕, $k_B$ はボルツマン定数,T は温度である.

問1 [ア]にあてはまる最も適切な数式を記せ.

問2 [ イ ], [ ウ ]にあてはまる最も適切な語句を記せ.

- 問3 A の濃度[A]が、反応の進行にしたがい小さくなると、反応速度vはどのようになるか、0次反応 (n=0) の場合と 1次反応 (n=1) の場合についてそれぞれ答えよ、
- 間 4 A の濃度[A]は時間に伴いどのように減少するか. 0 次反応 (n=0) の場合と 1 次反応 (n=1) の場合についてそれぞれ答えよ.
- 問 5 式(2.3)を用いて実験的に $E_a$ をもとめるには、どのような測定を行いどのような解析を行えばよいかを述べよ。