

構造化学(加納)

~ §3 原子の構造と性質 講義資料 ~
その2

3.3. 角運動量

• 方向量子化

$l=2$ のとき

$L = \sqrt{2 \times 3 \hbar^2} = \sqrt{6} \hbar (> 2 \hbar)$
 $L_z = 2 \hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2 \hbar$

• 許される方向はこの5通りしかない (方向量子化)
 • z軸まわりの角度は確定できない (L_z と L_x または L_y との間の不確定性関係)

図の出自: アトキンス物理化学

{ 矢印は真上を向けない。
 • xとpに不確定性原理 → L_x にも影響
 ⇒ L_z を決めると L_x が不確定。

3.3. 角運動量

• 回転スペクトルの実験例

図 11-3 CO分子の遠赤外線吸収スペクトル

物質の科学・量子化学(放送大学テキスト)

等間隔!!

3.3. 角運動量

• 回転スペクトル

$$E = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I} \equiv BJ(J+1)$$

B: 回転定数

* 分子の回転を表す場合には、LをJに置き換えるのが慣行になっている

回転遷移: $J+1 \leftarrow J$ (吸収)

$$\Delta E = E_{J+1} - E_J = 2B(J+1)$$

($J = 0, 1, 2, \dots$)

(エネルギー差にプランク定数が含まれていることに注意)

図 11-4 CO分子の回転エネルギー準位と遷移

3.3. 角運動量

• 回転スペクトルの解析

• CO分子の場合、スペクトルから

$$\bar{B} = 1.931 \text{ cm}^{-1} \quad (\bar{B} \text{ は波数単位: } \bar{B} = B/c)$$

問3-7: 実験結果から、 \bar{B} の値が上記になることを確認せよ。また、 \bar{B} の定義と右の表を用いて、COの結合距離 r(C-O)が1.128 Åとなることを示せ。ただし、 $I = \mu r^2$ である。

$m(^{12}\text{C}) = 12$	(原子質量単位の定義)
$m(^{16}\text{O}) = 15.995$	
h (プランク定数)	$= 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$
c (光速)	$= 2.9979 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$
N_A (アボガドロ定数)	$= 6.0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

まとめ

分子の慣性モーメントが求まる
→ 各原子の質量を用いて
分子の大きさがわかる

余談 その1 ~遠赤外線とマイクロ波~

電子レンジは2450MHz

http://www.atomin.go.jp/atomin/data/img/reference/radiation/22040502_01.jpg