

ヨウ素化合物の電子状態の計算

市川高校 2年 橋本向貴

[目的]

ヨウ素化合物でヨウ素デンプン反応を示さない吸収スペクトルの極大吸収波長が 450nm である物質が HIO である可能性が高いことが先輩の実験でわかった。実際に HIO が 450nm の部分に極大吸収波長をもつのかどうか計算化学を用いて検討した。

[実験方法]

化学大辞典に記載されている方法を基に次亜ヨウ素酸を作成した。
吸収スペクトルを測ったところ、450nm のあたりに極大吸収波長を持つ物質ができたことがわかった。

[計算方法・結果]

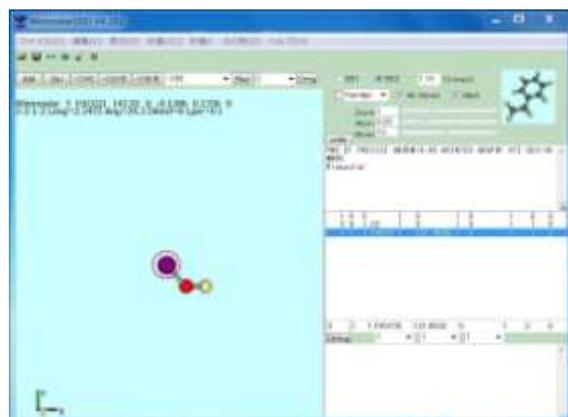
論理的に HIO が極大吸収波長を持つことを示すために、Winmostar というソフトを用いてヨウ素化合物分子の電子状態について計算し、バンドギャップから吸収波長を調べた。

Winmostar というソフトにて分子軌道計算したのち、エネルギーギャップ(=E [ev])を求めた。

この時に一度 EF 法と言う方法で分子の安定な構造を見つけた後 1SEF 法で電子軌道の持つエネルギーを特定した。

この時原子間の距離が近く計算できない状態もあったためこれを計算できるようにするために GEO-OK という条件も入れた。この時 HIO のもつ吸収波長の中には 450nm に近い結果が得られなかったため、CI 法を用いて電子がもともとなかった軌道に移ったことを考えて計算を行った。

すると HIO については 450nm に近い 513nm という他のヨウ素化合物(I₂,I₃⁻,I₅⁻,IO⁻,HIO₂,IO₂⁻,HIO₃,IO₃⁻)に比べて近い数値が出た。このことから HIO が 450nm の極大吸収波長を示す物質ではないかと考えられる。



[まとめ]

一年間通して行った実験では HIO について色以外でも化学大辞典とは異なる結果が出た。

具体的には pH についてや、比較的安定かどうかという点である。

特に色に関しては計算結果でも分かるように化学大辞典が間違っている可能性がより高いと言える。

[参考文献]

化学大辞典編集委員会編、化学大辞典 4、共立出版株式会社 (1964)

※要旨では具体的数値はいくつか省略した。