

[オプション課題 1] NaCl 分子のポテンシャルエネルギー

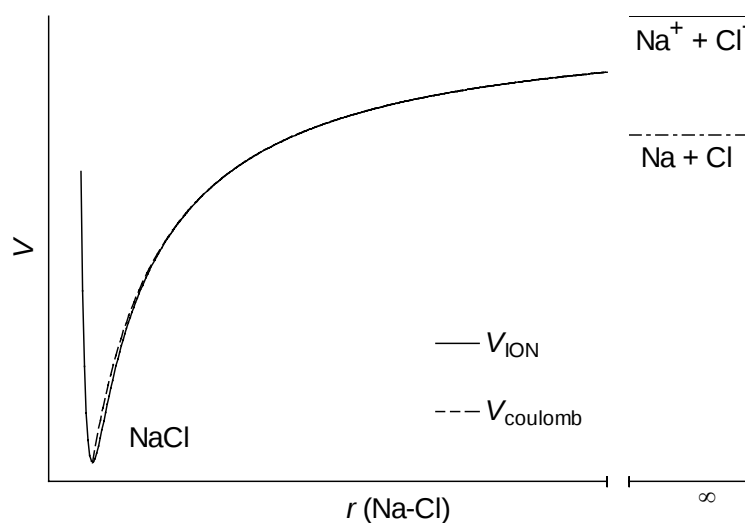


図 1-2. NaCl のイオン結合ポテンシャルとクーロンポテンシャル近似

気相の NaCl 分子はイオン結合性の強い分子であり、この分子が Na^+ と Cl^- に解離するポテンシャルエネルギー曲線は、非常によい近似で 2 つの点電荷の間のクーロン相互作用によって記述できる。2 つの点電荷 q_1, q_2 間のクーロンポテンシャルエネルギーは、電荷間の距離を r とすると、次式で表わされる。

$$V(r) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1-8)$$

(ϵ_0 : 真空の誘電率)

[問題 o1]

下の情報をもとに、気相 NaCl 分子の核間距離 r_e [単位: Å] を推算し、分光学によって決定されている核間距離の実験値、2.51 Å と比較せよ。

標準生成エンタルピー Na : 107 kJ mol⁻¹

Cl : 121 kJ mol⁻¹

NaCl : -180 kJ mol⁻¹

イオン化ポテンシャル Na : 5.14 eV

(Na を Na^+ にイオン化するために必要なエネルギー)

電子親和力 Cl : 3.61 eV

(Cl が Cl^- になって安定化するエネルギー)