

## [オプション課題 1] NaCl 分子のポテンシャルエネルギー

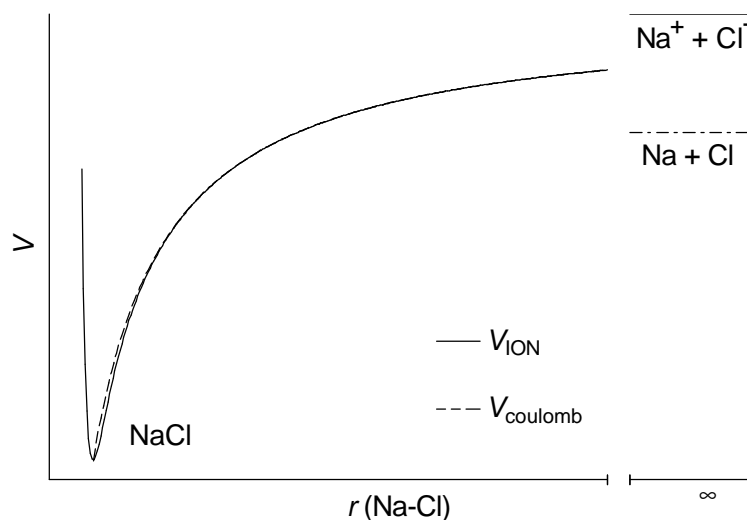


図 1-2. NaCl のイオン結合ポテンシャルとクーロンポテンシャル近似

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  $\text{Na}^+$  と  $\text{Cl}^-$  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。

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

( $\epsilon_0$ : 真空の誘電率)

## [問題 01]

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<sup>-1</sup>

   Cl : 121 kJ mol<sup>-1</sup>

   NaCl : -180 kJ mol<sup>-1</sup>

イオン化ポテンシャル      Na : 5.14 eV

(Na を  $\text{Na}^+$  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  $\text{Cl}^-$  になって安定化するエネルギー)