

[オプション課題 1] NaCl 分子のポテンシャルエネルギー

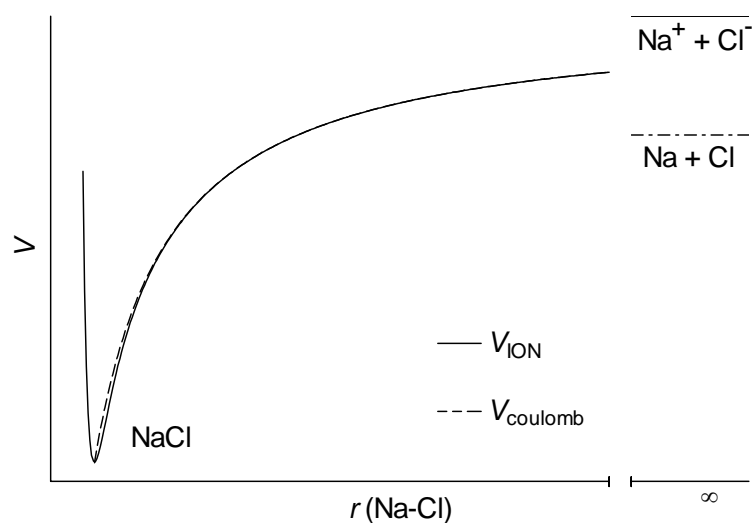


図 1-2. NaCl のイオン結合ポテンシャルとクーロンポテンシャル近似

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)

[オプション課題 2] 分子の振動－赤外活性・ラマン活性 (C₂H₂)

n 個の原子から成る分子は $3n$ 個の運動自由度を持つ。このうち 3 は分子の並進自由度、3 (非直線分子の場合) または 2 (直線分子) は分子の回転自由度であり、残りが振動の自由度である。すなわち、

$$\begin{aligned} \text{振動自由度} &= 3n - 6 && \text{(非直線分子)} \\ \text{振動自由度} &= 3n - 5 && \text{(直線分子)} \end{aligned} \tag{2-3}$$

ある振動運動が赤外吸収に観測されるか否か (赤外活性/不活性) は分子の双極子モーメント μ_d が振動座標 x により変化するか否かで決まる。

$$\partial\mu_d/\partial x \neq 0 \text{ なら赤外活性} \tag{2-4}$$

同様にラマン散乱に観測されるか否か (ラマン活性/不活性) は分極率 α が振動座標 x により変化するか否かで決まる (図 1-2)。

$$\partial\alpha/\partial x \neq 0 \text{ ならラマン活性} \tag{2-5}$$

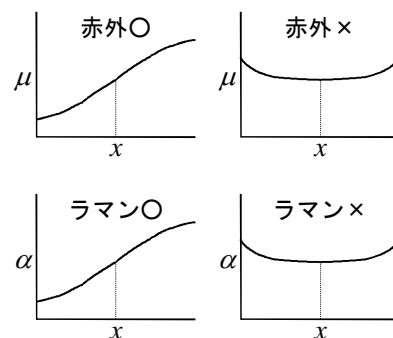
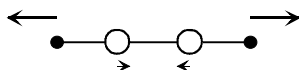


図 2-1. 赤外活性とラマン活性

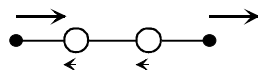
[問題 o2]

- a) アセチレン (H-C≡C-H), メチルアセチレン (CH₃-C≡C-H) の振動自由度はいくつか?
b) アセチレンの以下の振動モードの、赤外活性/不活性・ラマン活性/不活性を判別せよ。

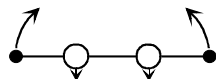
ν_1 : 対称 C-H 伸縮振動



ν_3 : 反対称 C-H 伸縮振動



ν_5 : 反対称 C-C-H 変角振動



- c) 上記以外のアセチレンの振動モードには、どのようなものがあるか考えよ。