

内部エネルギー・熱容量

	${}^mU$	${}^mC_V$
並進	$\frac{3}{2}RT$	$\frac{3}{2}R$
回転 ( $n_r$ : 回転自由度)	$\frac{n_r}{2}RT$	$\frac{n_r}{2}R$
$\left\{ \begin{array}{l} \text{直線分子 } (n_r = 2) \\ \text{非直線分子 } (n_r = 3) \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} RT \\ \frac{3}{2}RT \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} R \\ \frac{3}{2}R \end{array} \right.$
1つの振動 ( $x = h\nu/kT$ )	$\frac{x}{e^x - 1}RT$	$\frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}R$
	$RT$	$R$
単原子 (Einstein 模型)	$\frac{3x}{e^x - 1}RT$	$\frac{3x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}R$
固体 (Dulong-Petit 則)	$3RT$	$3R$

エントロピー

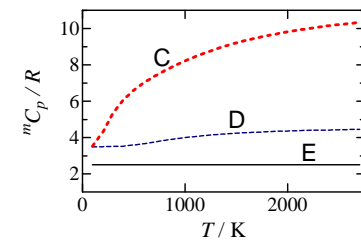
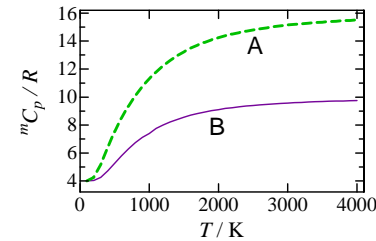
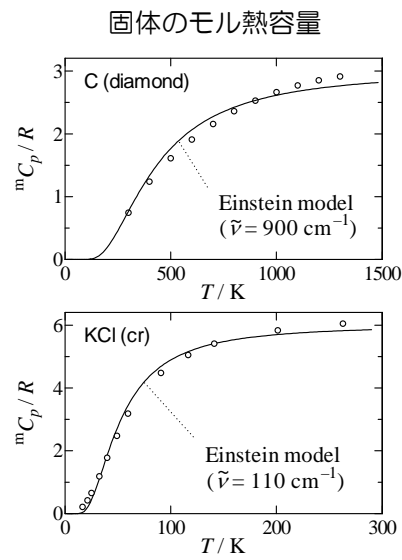
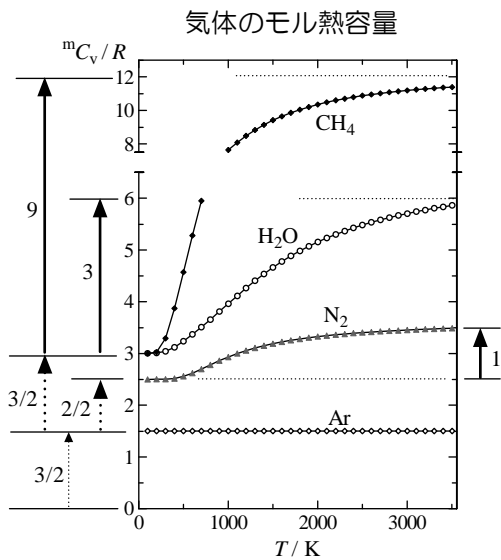
	${}^mS/R$
並進	$\frac{5}{2} + \ln q_{\text{trans}} - \ln \frac{p}{k_B T}$ , あるいは $\frac{3}{2} \ln \frac{m}{\text{amu}} + \frac{5}{2} \ln \frac{T}{\text{K}} - \ln \frac{p}{\text{bar}} - 1.1517$
回転 ( $n_r$ : 回転自由度)	$\frac{n_r}{2} + \ln q_{\text{rot}}$
1つの振動 ( $x = h\nu/kT$ )	$\frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x})$
電子状態	$\ln g_{\text{elec}}$

問題 8.1

図は完全気体の、定圧モル熱容量 ( ${}^mC_p/R$ ) を示したものである。

- A~E それぞれについて、 ${}^mC_{V, \text{trans}}/R$ ,  ${}^mC_{V, \text{rot}}/R$ ,  ${}^mC_{V, \text{vib}}/R$  を推定せよ。
- A~E はそれぞれ、以下の何れか？

Ne, CO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, SO<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>CO, CF<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>



問題 8.2

- 800 K, 1bar における気相反応 I<sub>2</sub> → 2I の、並進, 回転, 振動, 電子状態のエントロピー変化を以下から計算せよ。(I の原子量 = 126.9, k = 0.69504 cm<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>)

	I <sub>2</sub>	I
電子状態 ( $g_{\text{elec}}$ )	$X^1\Sigma_g^+ (1)$	$5^2P_{3/2} (4)$
$\tilde{\nu}$ [cm <sup>-1</sup> ]	213.3	
$B$ [cm <sup>-1</sup> ] ( $\sigma$ )	0.03732 (2)	

- 上の結果と、0 K, 1bar における反応エンタルピー,  $\Delta_r H^\circ_{0K} (I_2 \rightarrow 2I) = 148.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ , から 800 K における圧平衡定数を計算せよ。
- 800 K において初期分圧 1 mbar の I<sub>2</sub> は定容等温平衡条件で何%分解するか？

他の熱力学関数

エンタルピー	$H - H(0) = U - U(0) + pV$
ヘルムホルツエネルギー	$A - A(0) = U - U(0) - TS$
ギブスエネルギー	$G - G(0) = H - H(0) - TS$