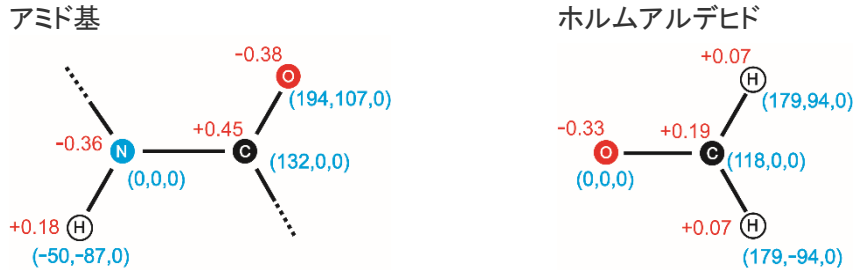


復習問題1

問1. 次の一連の分子のうちすべての極性分子を選び、永久双極子の向きを図示せよ。

H₂, O₂, N₂, O₃, HCl, CH₄, CO₂, H₂O, NH₃, Cl₂, CHCl₃, CCl₄, アセトン, o-ジクロロベンゼン, m-ジクロロベンゼン, p-ジクロロベンゼン

問2. 図に示した情報(電荷および座標の単位はそれぞれ e, pm)を使って、アミド基およびホルムアルデヒドの永久双極子モーメントの向きと大きさを示せ(教科書の例題・自習問題とは座標をかえてあるの注意)。



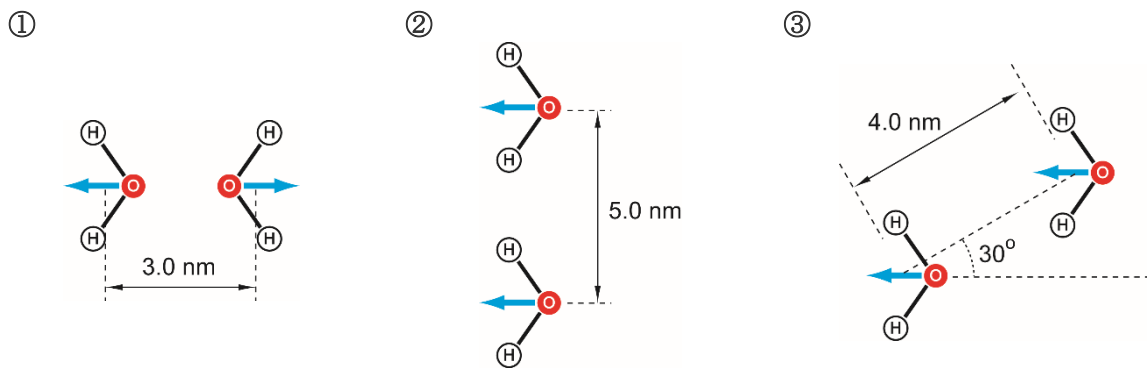
問3. ある分子に $E = 2.0 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$ の電場を加えた時に誘起される誘起双極子モーメントが $\mu^* = 9.8 \times 10^{-6} \text{ D}$ であった。この分子の分極率および分極率体積はいくらかを計算せよ。

問4. ① 二つのリチウムイオン Li^+ が真空中で 100 nm 離れておかれているとき、この二つのリチウムイオン間に働く相互作用のポテンシャルエネルギーはいくらか計算せよ。

② マグネシウムイオン Mg^{2+} と塩素イオン Cl^- が比誘電率 3.5 の媒質中で 200 nm 離れておかれているとき、これらのイオン間に働く相互作用のポテンシャルエネルギーはいくらか計算せよ。

問5. 真空中で、マグネシウムイオン Mg^{2+} から 10 nm におかれた H_2O 分子 ($\mu = 1.85 \text{ D}$) の方向を反転させるのに必要なモルエネルギーを計算せよ。(ヒント: H_2O 分子の双極子モーメントが Mg^{2+} の方向を向いているときと逆を向いているときのポテンシャルエネルギーの差を求めればよい)

問6. 二つの H_2O 分子 ($\mu = 1.85 \text{ D}$) が真空中で図に示した①~③の配置で固定されているとき、それぞれの場合の H_2O 分子間に働く相互作用(モルポテンシャルエネルギー)を計算せよ。



問7. 問6 ① で、二つの H_2O 分子が 300 K で回転していると考えた場合、二つの H_2O 分子間に働く相互作用(モルポテンシャルエネルギー)をそれぞれ計算せよ。

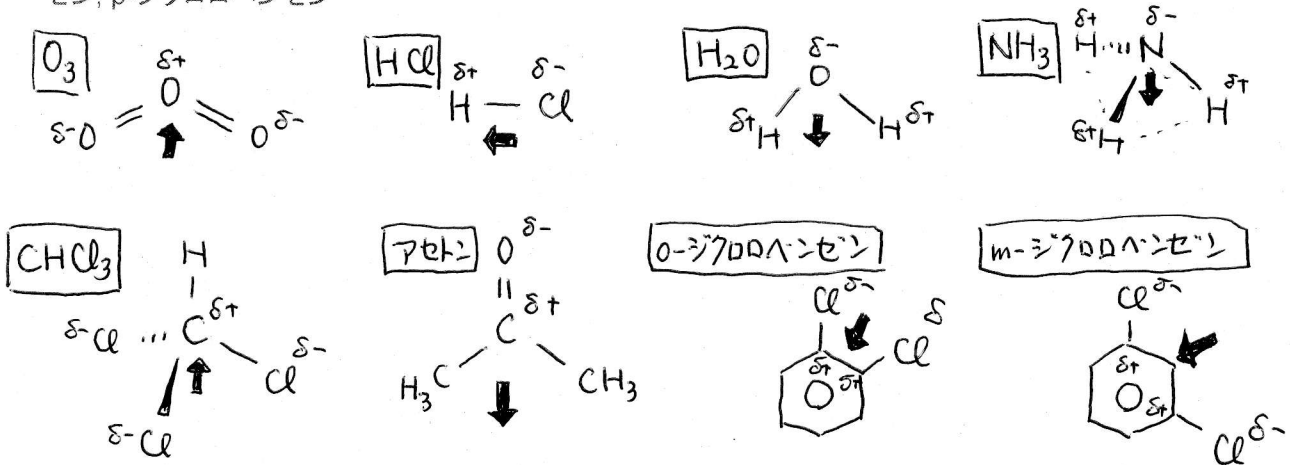
問8. 真空中で 2 nm 離れた二つのアルゴン Ar 原子間に働くロンドン相互作用を計算せよ。必要なデータは教科書に記載されている。

問9. レナードジョーンズポテンシャルエネルギーの式 $V = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right\}$ において、ポテンシャルエネルギー V が最も小さくなる距離 r を求めよ。

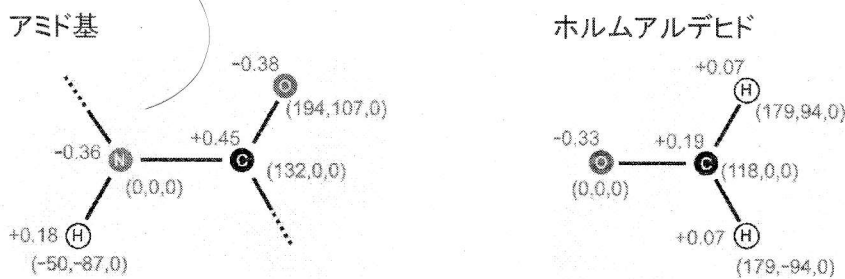
復習問題1 解答例

問1. 次の一連の分子のうちすべての極性分子を選び、永久双極子の向きを図示せよ。

H₂, O₂, N₂, O₃, HCl, CH₄, CO₂, H₂O, NH₃, Cl₂, CHCl₃, CCl₄, アセトン, o-ジクロロベンゼン, m-ジクロロベンゼン, p-ジクロロベンゼン



問2. 図に示した情報(電荷および座標の単位はそれぞれ e, pm)を使って、アミド基およびホルムアルデヒドの永久双極子モーメントの向きと大きさを示せ(教科書の例題・自習問題とは座標をかえてあるの注意)。



アミド基 (H, N, C, O a 頂に計算)

$$\begin{aligned} \mu_x &= (+0.18e)(-50\text{ pm}) + (-0.36e)(0\text{ pm}) + (+0.45e)(132\text{ pm}) + (-0.38e)(194\text{ pm}) \\ &= -23.32\text{ e pm} = -23.32 \times (1.602 \times 10^{-19}\text{ C}) \times (10^{-12}\text{ m}) = -3.736 \times 10^{-30}\text{ Cm} \\ &= -1.120\text{ D} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu_y &= (+0.18e)(-87\text{ pm}) + (-0.36e)(0\text{ pm}) + (+0.45e)(0\text{ pm}) + (-0.38e)(107\text{ pm}) \\ &= -56.32\text{ e pm} = -9.022 \times 10^{-30}\text{ Cm} = -2.705\text{ D} \end{aligned}$$

$$\mu_z = 0\text{ D}$$

$$\therefore \mu = \sqrt{(-1.120\text{ D})^2 + (-2.705\text{ D})^2} = \underline{\underline{2.93\text{ D}}}$$

ホルムアルデヒド (O, C, 2aH, 2bH a 頂に計算)

$$\begin{aligned} \mu_x &= (-0.33e)(0\text{ pm}) + (+0.19e)(118\text{ pm}) + (+0.07e)(179\text{ pm}) + (+0.07e)(179\text{ pm}) \\ &= 47.48\text{ e pm} = 7.606 \times 10^{-30}\text{ Cm} = 2.28\text{ D} \end{aligned}$$

$$\mu_y = (-0.33e)(0\text{ pm}) + (+0.19e)(0\text{ pm}) + (+0.07e)(94\text{ pm}) + (+0.07e)(-94\text{ pm}) = 0$$

$$\mu_z = 0$$

$$\therefore \mu = \mu_x = \underline{\underline{2.28\text{ D}}}$$

問3. ある分子に $E = 2.0 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$ の電場を加えた時に誘起される誘起双極子モーメントが $\mu^* = 9.8 \times 10^{-6} \text{ D}$ であった。この分子の分極率および分極率体積はいくらかを計算せよ。

$$\mu^* = \alpha E \text{ より}$$

$$\alpha = \frac{\mu^*}{E} = \frac{(9.8 \times 10^{-6})(3.336 \times 10^{-30} \text{ cm})}{2.0 \times 10^5 (\text{Vm}^{-1} = \text{NC}^{-1})} = 1.635 \times 10^{-40} \text{ C}^2 \text{ m}^2 \text{ J}^{-1}$$

$$\approx 1.6 \times 10^{-40} \text{ C}^2 \text{ m}^2 \text{ J}^{-1}$$

$$\alpha' = \frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0} = \frac{1.635 \times 10^{-40} \text{ C}^2 \text{ m}^2 \text{ J}^{-1}}{4\pi \times 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}} = 1.469 \times 10^{-30} \text{ m}^3$$

$$\approx 1.5 \times 10^{-30} \text{ m}^3$$

問4. ① 二つのリチウムイオン Li^+ が真空中で 100 nm 離れておかれているとき、この二つのリチウムイオン間に働く相互作用のポテンシャルエネルギーはいくらか計算せよ。

$$V = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{(1 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C})^2}{4\pi \times (8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}) \times (100 \times 10^{-9} \text{ m})}$$

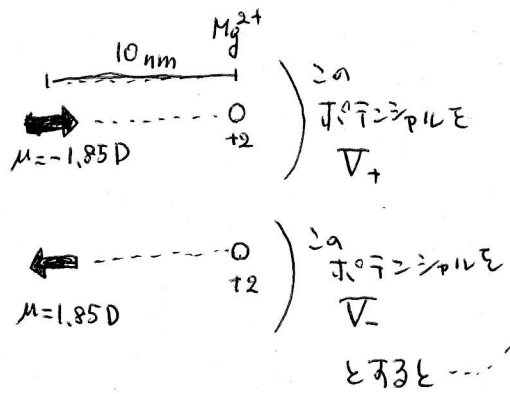
$$= 2.307 \times 10^{-21} \text{ J}$$

② マグネシウムイオン Mg^{2+} と塩素イオン Cl^- が比誘電率 3.5 の媒質中で 200 nm 離れておかれているとき、これらのイオン間に働く相互作用のポテンシャルエネルギーはいくらか計算せよ。

$$V = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r} = \frac{(+2 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C})(-1 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C})}{4\pi \times (8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}) \times 3.5 \times (200 \times 10^{-9} \text{ m})}$$

$$= -6.590 \times 10^{-22} \text{ J}$$

問5. 真空中で、マグネシウムイオン Mg^{2+} から 10 nm におかれた H_2O 分子 ($\mu = 1.85 \text{ D}$) の方向を反転させるのに必要なモルエネルギーを計算せよ。(ヒント: H_2O 分子の双極子モーメントが Mg^{2+} の方向を向いているときと逆を向いているときのポテンシャルエネルギーの差を求めればよい)



反転エネルギーは $V_+ - V_-$ と求まる

$$V = -\frac{\mu_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \text{ とあるから}$$

$$V_+ - V_- = \left(-\frac{(-1.85\text{D})Q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \left(-\frac{(1.85\text{D})Q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)$$

$$= 2 \times \frac{(1.85 \times 3.336 \times 10^{-30} \text{ Cm})(2 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C})}{4 \times \pi \times (8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}) \times (10 \times 10^{-9} \text{ m})^2}$$

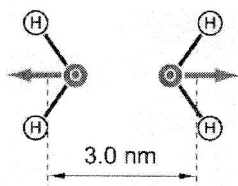
$$= 3.554 \times 10^{-22} \text{ J}$$

モルあたりでは

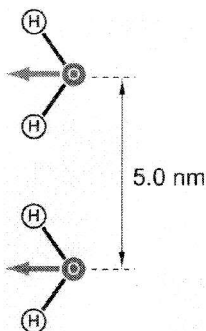
$$3.554 \times 10^{-22} \times 6.022 \times 10^{23} = 214 \text{ J mol}^{-1}$$

問6. 二つの H_2O 分子 ($\mu = 1.85 \text{ D}$) が真空中で図に示した①～③の配置で固定されているとき、それぞれの場合の H_2O 分子間に働く相互作用(モルポテンシャルエネルギー)を計算せよ。

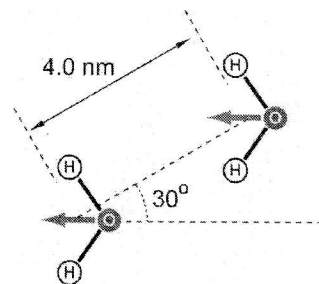
①



②



③



$$\textcircled{1} \quad V = \frac{\mu_1 \mu_2 (1 - 3 \cos^2 \theta)}{4\pi \epsilon_0 r^3} = \frac{(1.85 \times 3.336 \times 10^{-30} \text{ Cm})(-1.85 \times 3.336 \times 10^{-30} \text{ Cm})(1 - 3 \cos^2 0^\circ)}{4\pi \times (8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1})(3.0 \times 10^{-9} \text{ m})^3}$$

$$= 2.536 \times 10^{-23} \text{ J}$$

モルあたり

$$2.536 \times 10^{-23} \times 6.022 \times 10^{23} = \underline{15.2 \text{ J mol}^{-1}}$$

$$\textcircled{2} \quad V = \frac{\mu_1 \mu_2 (1 - 3 \cos^2 \theta)}{4\pi \epsilon_0 r^3} = \frac{(1.85 \times 3.336 \times 10^{-30} \text{ Cm})^2 (1 - 3 \cos^2 90^\circ)}{4\pi \times (8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1})(5.0 \times 10^{-9} \text{ m})^3}$$

$$= 2.739 \times 10^{-24} \text{ J}$$

モルあたり

$$2.739 \times 10^{-24} \times 6.022 \times 10^{23} = \underline{1.65 \text{ J mol}^{-1}}$$

$$\textcircled{3} \quad V = \frac{\mu_1 \mu_2 (1 - 3 \cos^2 \theta)}{4\pi \epsilon_0 r^3} = \frac{(1.85 \times 3.336 \times 10^{-30} \text{ Cm})^2 (1 - 3 \cos^2 30^\circ)}{4\pi \times (8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1})(4.0 \times 10^{-9} \text{ m})^3}$$

$$= -6.686 \times 10^{-24} \text{ J}$$

モルあたり

$$-6.686 \times 10^{-24} \times 6.022 \times 10^{23} = \underline{-4.03 \text{ J mol}^{-1}}$$

問7. 問6 ① で、二つの H_2O 分子が 300 K で回転していると考えた場合、二つの H_2O 分子間に働く相互作用(モルポテンシャルエネルギー)をそれぞれ計算せよ。

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= - \frac{2 \mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0)^2 k_B T} \times \frac{1}{r^6} \\ &= - \frac{2 \times (1.85 \times 3.336 \times 10^{-30} \text{ Cm})^4}{3(4\pi \times 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1})^2 (1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}) \times (300 \text{ K})} \times \frac{1}{(3.0 \times 10^{-9} \text{ m})^6} \\ &= -2.587 \times 10^{-26} \text{ J} \end{aligned}$$

モルあたり

$$-2.587 \times 10^{-26} \times 6.022 \times 10^{23} = \underline{\underline{-1.56 \times 10^{-2} \text{ J mol}^{-1}}}$$

問8. 真空中で 2 nm 離れた二つのアルゴン Ar 原子間に働くロンドン相互作用を計算せよ。必要なデータは教科書に記載されている。

$$\text{Ar} \alpha' = 1.66 \times 10^{-30} \text{ m}^3, \quad I = 1520.4 \text{ kJ mol}^{-1} \quad \text{より}$$

$$\begin{aligned} V &= - \frac{3}{2} \alpha'_1 \alpha'_2 \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2} \times \frac{1}{r^6} = - \frac{3}{2} \times (1.66 \times 10^{-30} \text{ m}^3)^2 \times \frac{1520.4 \times 10^3 \text{ J mol}^{-1}}{2} \times \frac{1}{(2.0 \times 10^{-9} \text{ m})^6} \\ &= \underline{\underline{-4.91 \times 10^{-2} \text{ J mol}^{-1}}} \end{aligned}$$

問9. レナード-ジョーンズポテンシャルエネルギーの式 $V = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right\}$ において、ポテンシャルエネルギー V が最も小さくなる距離 r を求めよ。

V の最小値を与える距離 r をとす

$$\frac{dV}{dr} = 0 \quad \text{とすべきから}$$

$$\frac{dV}{dr} = 4\epsilon \left(-12 \cdot \frac{r_0^{12}}{r^{13}} + 6 \frac{r_0^6}{r^7} \right) = 0 \quad \text{より} \quad 2 \frac{r_0^6}{r^6} = 1$$

$$\therefore r = r_0 \times 2^{\frac{1}{6}}$$

$$\doteq 1.22 r_0$$