

2021年2月3日

2020年度 化学統計熱力学Ⅱ-2 期末試験問題 (10:30~12:00)

加納博文

問題は未だ開かないでください。監督者の指示を待ってください。解答用紙に学生証番号と名前を記入してください。試験は教科書・ノート等何も見えてはいけません。また、携帯電話等記憶可能な機能を有する計時装置や計算機も机に置いてはいけません。時間がわからない場合は監督者に尋ねてください。

設問（問1～7）のすべての問いに答えなさい。計算は筆算で行ってください。

解答用紙は裏面も使ってください。そうでない場合は減点します。それでも用紙が足りない場合は監督者に連絡して解答用紙をもらってください。

30分経過後、試験終了者は解答用紙を提出してから退出してかまいません。

次の設問（問1～6）のすべての問いに答えよ。

ただし、 T : 絶対温度, R : 気体定数 ($8.3 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$), k_B : ボルツマン定数 ($1.4 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$), N_A : アボガドロ定数 ($6.0 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$), ϵ_0 : 真空の誘電率 ($9.0 \times 10^{-12} \text{ C}^2\cdot\text{J}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$) および e : 電気素量 ($1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$), $1 \text{ D (デバイ)} = 3.3 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$ とする。

問1 次の問いに答えよ。

1) $+e$ と $-e$ の2つの電荷が0.1 nm 離れているときの双極子モーメントの大きさは、何D (デバイ)か、計算して求めよ。計算過程も示せ。

2) 酸素分子とオゾン分子では異なる双極子モーメントをもつ。その理由を述べよ。

3) 塩素分子、臭素分子、ヨウ素分子について、分極率の大きい順に並べ、その理由を記せ。

問2 平行に配置された2つの双極子モーメント間のポテンシャルエネルギーは一般に

$$V = -\mathbf{E}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 = \frac{\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} - \frac{3(\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_2 \cdot \mathbf{r})}{4\pi\epsilon_0 r^5} \quad \text{で与えられる。以下の問いに答えよ。}$$

1) 2つの双極子モーメントとベクトル \mathbf{r} の角度を θ とすると、このポテンシャルエネルギーを θ の関数として、各双極子モーメントの大きさなどを用いて表せ。

2) 1)で得られる式の角度に関する部分を $f(\theta)$ とし、双極子モーメントが自由に回転するとき、その平均値 $\langle f(\theta) \rangle$ を計算して求めよ。

問3 次の問いに答えよ。

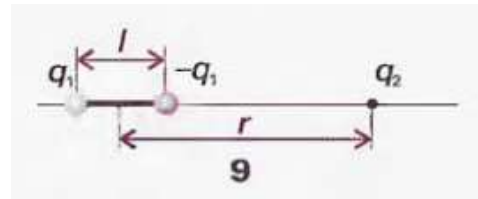
1) 双極子より高次の多重極子をもつ分子の例を挙げ、どのように多重極子になるかを説明せよ。

2) 永久双極子 $\mu = 1.0 \text{ D}$ をもつ分子のモル分極率は、 $P_m = \frac{N_A}{3\epsilon_0} \left(\alpha + \frac{\mu^2}{3k_B T} \right)$ で与えられる。分極

率が $\alpha = 1.0 \times 10^{-39} \text{ C}^2 \cdot \text{m}^2 \cdot \text{J}^{-1}$ のとき、300 K におけるモル分極を $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ の単位で求めよ。計算過程も示せ。

問4 点電荷 q_2 と双極子モーメントが右の図のような配置にある時、ポテンシャルエネルギー V

が $V = -\frac{\mu_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$ となることを示せ。



問5 次の問いに答えよ。

1) ロンドン相互作用（分散相互作用）について説明せよ。

2) 疎水性相互作用について説明せよ。

問6 次の問いに答えよ。

1) Lennard-Jones ポテンシャルの式をかけ。この際、各パラメータを説明せよ。

2) 隣の分子が安定な位置にあるときの分子間距離を求めよ。計算過程も示せ。

問7 次の問いに答えよ。

1) デバイ - ヒュッケル理論において用いられる遮蔽されたクーロンポテンシャルの式を書き、内容について説明せよ。

2) デバイ - ヒュッケル理論について簡潔に説明せよ。