

[物理化学基礎]

図は等核2原子分子の断熱ポテンシャルエネルギー曲線を模式的に描いたものである。以下の設問に答えよ。ただし、 ν は振動量子数である。計算は必ずその過程を示し、結果はすべて有効数字2桁で示せ。また必要に応じて以下の定数を用いよ。光速 $c = 3.00 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ 、Boltzmann 定数 $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ 、Planck 定数 $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$ 。

- (1) 核間距離が r_e より小さくなるとポテンシャルエネルギーが急激に増大する理由を述べよ。 r_e はどのような物理量を表すか。
- (2) 核間距離が r_e より大きくなるとポテンシャルエネルギーが一定値 D に漸近する理由を述べよ。 D はどのような物理量を表すか。
- (3) $\nu = 1 \leftarrow \nu = 0$ の振動遷移を観測するにはどのような実験手法が適当であるか。その理由とともに答えよ。
- (4) ある等核2原子分子の振動スペクトルを測定したところ $\nu = 1 \leftarrow \nu = 0$ の遷移振動数は $1.50 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ であった。これに対応する遷移波数および遷移エネルギーを求めよ。
- (5) (4) の等核2原子分子において、Boltzmann 分布を仮定して、300 K における $\nu = 1$ 状態の $\nu = 0$ 状態に対する占位数比を求めよ。ただし、指数関数の計算には、3次までの冪級数展開を用いよ。
- (6) (4) の等核2原子分子において、 $\nu = 6$ 状態と $\nu = 0$ 状態のエネルギー差の最大値を推定せよ。
- (7) (6) の結果に基づき、Boltzmann 分布を仮定して、温度 300 K および 1800 K における $\nu = 6$ 状態の $\nu = 0$ 状態に対する占位数比の最小値を推定せよ。
- (8) 温度を高くすると、この2原子分子が解離する確率が高くなる。この事実を図のポテンシャルエネルギー曲線に基づいて解釈せよ。

