

### 例題 7.1 波長-振動数の変換

合衆国で市販の電子レンジ(マイクロ波オーブン)の放射波の振動数は 2.45 GHz(ギガヘルツ、 $1 \text{ GHz} = 10^9 / \text{s}$ )です。この放射波の波長(m 単位)は? オレンジ光(625 nm)よりどれだけ長いあるいは短いでしょうか?

答え:

マイクロ波の振動数は式 7.1 から直接求められます。

$$\lambda = c / \nu = (2.998 \times 10^8 \text{ m/s}) / (2.45 \times 10^9 \text{ s}^{-1}) = 0.122 \text{ m}$$

$$\lambda (\text{マイクロ波}) / \lambda (\text{オレンジ光}) = (0.122 \text{ m}) / (6.25 \times 10^{-9} \text{ m}) = 196,000$$

マイクロ波の波長はオレンジ光よりほぼ 200,000 倍長い。

### 例題 7.2 光子エネルギーの計算

レーザーの赤色光光子のモル当たりのエネルギー(175 kJ / mol)を波長 2.36 nm の X 線の光子のモル当たりのエネルギーを比較しなさい。何倍違いますか。

答え:

計算を教科書のスキームに従って行います。まず波長を m 単位で表します。

$$2.36 \text{ nm} \cdot (1 \times 10^{-9} \text{ m} / \text{nm}) = 2.36 \times 10^{-9} \text{ m}$$

次に、振動数を計算します。

$$\text{振動数 } \nu = c / \lambda = (2.998 \times 10^8 \text{ m/s}) / (2.36 \times 10^{-9} \text{ m}) = 1.27 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$$

プランクの式からエネルギーを計算します。

$$E = h\nu = (6.626 \times 10^{-34} \text{ Js/photon})(1.27 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}) = 8.42 \times 10^{-17} \text{ J} / \text{photon}$$

最後に、光子モル当たりのエネルギーを計算します。

$$E = (8.42 \times 10^{-17} \text{ J} / \text{photon})(6.022 \times 10^{23} \text{ photons} / \text{mol}) = 5.07 \times 10^7 \text{ J mol}^{-1}$$

X 線の光子のモル当たりのエネルギーは  $5.07 \times 10^4 \text{ kJ mol}^{-1}$  で赤色光光子のモル当たりのエネルギー(175 kJ / mol)よりもずっと大きな値です。

$$E (\text{X 線の光子}) / E (\text{赤色光光子}) = (5.07 \times 10^4 \text{ kJ mol}^{-1}) / (175 \text{ kJ mol}^{-1}) = 290$$

### 例題 7.3 H 原子の基底および励起状態のエネルギー

式 7.4 を使って、水素原子の  $n=1$  および  $n=2$  状態のエネルギーを原子当たりジュール数で、モル当たりのキロジュール数で計算しなさい。 $R=1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ ,  $h=6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ ,  $c=2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$  を式に用いなさい。

答え:

$n = 1$  の時、H 原子の電子のエネルギーは

$$E_1 = -Rhc / n^2 = -Rhc / 1^2 = -Rhc$$

$$= -(1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}) \cdot (6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}) \cdot (2.998 \times 10^8 \text{ m/s}) = -2.179 \times 10^{-18} \text{ J/atom}$$

$n=2$  の時、

$$E_2 = -Rhc / 2^2 = E_1 / 4 = (-2.179 \times 10^{-18} \text{ J/atom}) / 4 = -5.448 \times 10^{-19} \text{ J} / \text{atom}$$

アボガドロ数と  $1 \text{ kJ} = 1000 \text{ J}$  を使って原子当たりの値をモル当たりに変換します。

$$E_1 = (-2.179 \times 10^{-18} \text{ J/atom}) \cdot (6.022 \times 10^{23} \text{ atoms} / \text{mol}) \cdot (1 \text{ kJ} / 1000 \text{ J}) = -1312 \text{ kJ} / \text{mol}$$

最後に  $E_2 = E_1 / 4 = -328 \text{ kJ} / \text{mol}$

計算したエネルギーが共に負であることに注目して下さい。

#### 例題 7.4 原子スペクトル線のエネルギー

ボーア理論を使って励起 H 原子の可視スペクトルの緑色の線の波長を計算して下さい。

答え：

緑色の線は水素の可視スペクトルで二番目にエネルギーの大きな線です(Fig. 7.13)、 $n=4$  から  $n=2$  への電子遷移で起こります。式 7.5 を用い、 $n_{\text{final}} = 2$  と  $n_{\text{initial}} = 4$  とし計算すると、次式になります。

$$\Delta E = -Rhc \left[ \left( \frac{1}{2^2} \right) - \left( \frac{1}{4^2} \right) \right] = -Rhc (0.1875)$$

$Rhc$  は  $1312 \text{ kJ/mol}$  ですから、 $n=4$  から  $n=2$  への遷移は次式のエネルギー変化を含みます。

$$\Delta E = -(1312 \text{ kJ/mol}) \cdot (0.1875) = -246.0 \text{ kJ/mol}$$

波長は  $E_{\text{photon}} = h\nu = hc / \lambda$  で計算できます。

$$\begin{aligned} \lambda &= hc / E_{\text{photon}} = (6.626 \times 10^{-34} \text{ J/photon}) \cdot (6.022 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}) / (246000 \text{ J/mol}) \\ &= 4.863 \times 10^{-7} \text{ m} = 4.863 \times 10^{-7} \text{ m} \cdot (10^9 \text{ nm/m}) = 486.3 \text{ nm} \end{aligned}$$

実験値は  $486.1 \text{ nm}$  です(Fig. 7.13 参照)。実験と理論の良い一致を示しています。

#### 例題 7.5 ド・ブロイの式を用いて

光の速度の 40% の速さで動く質量  $m = 9.109 \times 10^{-28} \text{ g}$  の電子の波長を計算して下さい。

解：まず関係する単位を考える。波長は  $h / mv$ 、ここで  $h$  は  $(\text{J}\cdot\text{s})$  単位で表されます。

6 章から  $1 \text{ J} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}^2$ 。従って、質量はキログラム単位で、速度は秒当たりのメートル単位で表します。

$$\text{電子質量} = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\text{電子の速度} = (0.400) \times (2.998 \times 10^8 \text{ m/s}) = 1.20 \times 10^8 \text{ m/s}$$

これらの値をド・ブロイの式に代入します

$$\begin{aligned} \lambda &= h / mv = (6.626 \times 10^{-34} \text{ (kg}\cdot\text{m}^2 / \text{s}^2) (\text{s})) / [(9.109 \times 10^{-31}) \times (1.20 \times 10^8 \text{ m/s})] \\ &= 6.06 \times 10^{-12} \text{ m} \end{aligned}$$

ナノメートル単位では

$$= 6.06 \times 10^{-3} \text{ nm}$$

この波長は水素原子の直径の約  $1/20$  にしか過ぎません。