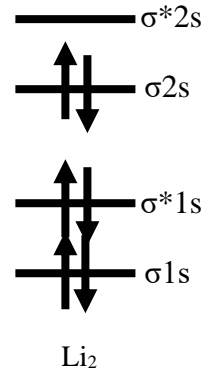


第十三回:『分子構造と結合(V)』(今回は2ページあり) (提出先:29号館1104号室)

問1. He原子の2つからHe₂が出来たと仮定する(実際に存在するかどうかはともかく, あると仮定しよう).

(a) 2つのHe原子の1s軌道からは, どのような分子軌道が生じるか? 生じる全ての分子軌道の実際の形を, 軌道の符号(正負)もわかるように図に書き, それぞれの軌道のエネルギーが元の1s軌道より高い(=反結合性)のか低い(=結合性)のかを書け. (両方で0.5点)



(b) 軌道に電子が入っている状態は, 例えば右図のように描く(右図はLi₂分子の電子配置の例). これと同様に, He₂分子の電子配置を書いてみよ. (0.25点. もともとのHe原子の軌道は書かないこと! 書いたものは無効とする)

(c) このHe₂分子は, 安定に存在できると思うか? 理由も含めて答えよ.

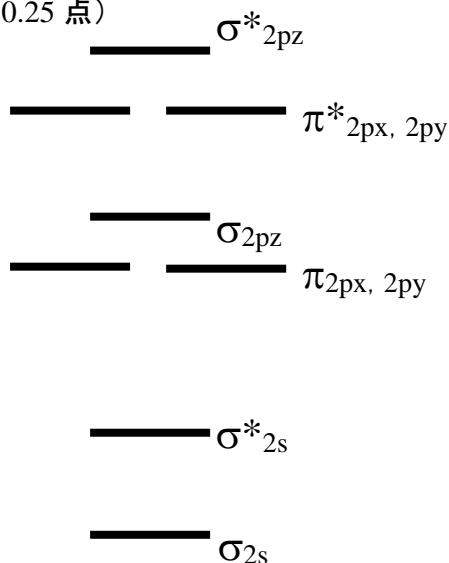
※「希ガス原子だから結合を作らない」というのは理由にならない. 電子配置を使って説明すること. なお, ここで言う「安定」とは, 原子がバラバラな状態より, 分子を作った方がエネルギーが下がる, という意味である. (0.25点)

(d) He₂分子から電子を一つ引き抜き, He₂⁺という分子になったとする. この時, 結合の強さはどうなるか? この分子は安定に存在できると思うか?

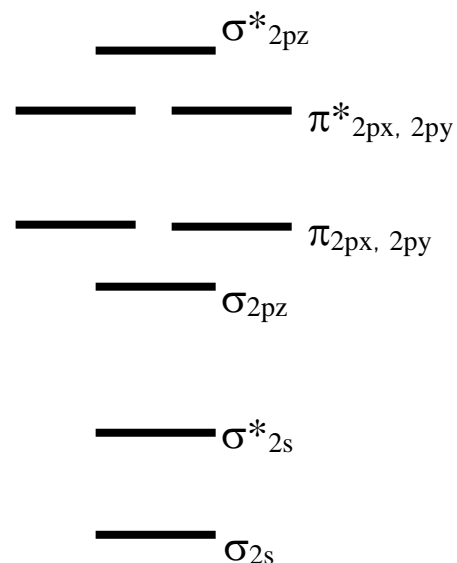
前問と同じく, ここで言う「安定」とは, 原子がバラバラな状態(He原子1つとHe⁺イオン1つが独立に存在する状態)より, 分子を作った方がエネルギーが下がる, という意味である. (0.25点)

問2. 講義で述べた様に, Li₂からN₂までの等核二原子分子の分子軌道のエネルギーは下図左のような順序に, O₂からNe₂までは下図右のような順序になっている(ただし, 内殻の1s軌道から生じるσ_{1s}およびσ*_{1s}は省略してある). なお, 名称に「*」が付いている軌道は反結合性軌道である.

この図をもとに, Be₂, B₂, N₂, F₂の4種類の等核二原子分子に関し, (a) 結合性軌道に入っている電子の数, (b) 反結合性軌道に入っている電子の数, (c) 結合の次数(結合無し, 単結合, 二重結合, 三重結合など), (d) 不対電子の数, をそれぞれ求めよ. なお, 内殻電子(1s軌道の電子)は考えなくてよい. (各分子につきすべて正解で0.25点)

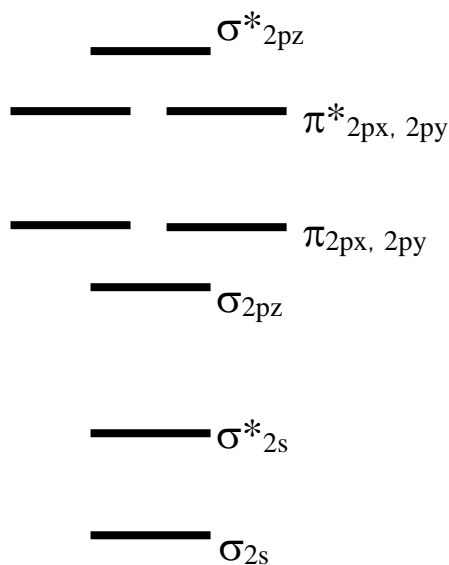


Li₂~N₂の場合の分子軌道の順序



O₂~Ne₂の場合の軌道の順序

問 3. O_2 に関し, 以下の問いに答えよ. なお, 前問にもある通り, 酸素分子の軌道の順序は以下のようになっている(前問と同様に, 内殻電子は無視して良い).



酸素分子 O_2 の分子軌道の準位

(a) 中性の O_2 分子の結合の次数と, 不対電子の数を求めよ. (0.25 点)

(b) O_2 分子から電子を 1 つ引き抜いて O_2^+ にするとどのような電子配置になるかを考え, その時の結合の次数を求めよ. また, 酸素分子に比べその磁性の強さ(≡不対電子の数)は大きくなるか? 小さくなるか? それとも変わらないか? 理由も含め説明せよ. (0.25 点)

(c) O_2 分子に今度は電子を 2 つ付け加えて, O_2^{2-} というイオンにした場合を考えよう. この場合, 結合の強さ(結合の次数)はどうなるか? 磁性はどうなると考えられるか? それぞれ理由も含め答えよ. (0.25 点)