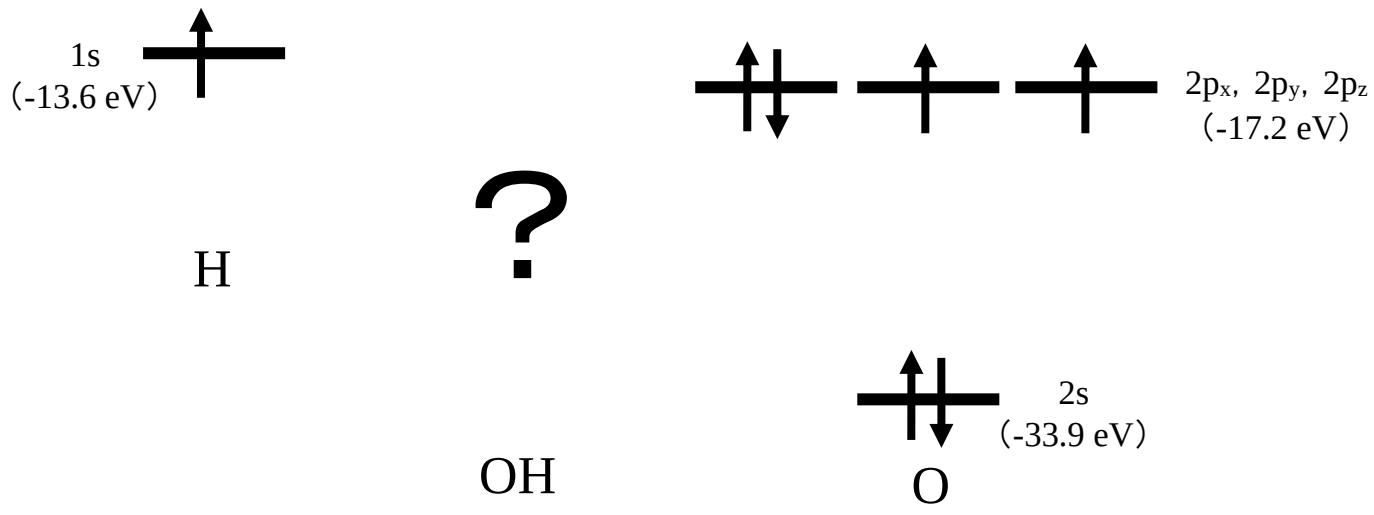
第十四回:『分子構造と結合(VI)』(提出先:29 号館 1104 号室)

問 1. 酸素原子 1 つと水素原子 1 つから出来る, OH ラジカルに関して考えよう. なおこの分子は活性酸素と呼ばれる分子群の一つであるが, その中でも特に反応性や酸化力が高い事が知られている.
酸素原子と水素原子の最外殻の軌道のエネルギーの位置関係は以下の通りである. なお, 括弧内の数字はその軌道のエネルギーを示している. エネルギーは真空中に電子が単独で存在する場合がゼロとし, それより安定なほどマイナス側に大きくなっていく. この図をもとに, 以下の問に答えよ.



(a) 酸素原子と水素原子が 1 つずつ結合して出来る OH ラジカルでは, どんな分子軌道が生じるのかを考え, 分子軌道のダイヤグラム(上図のように, 縦軸をエネルギーとして, 各軌道の順序を書いた図)を書け. この時, OH 分子の軌道は, 各原子のどの軌道が混ざって出来たものなのか(もしくは元の原子の軌道そのままなのか)がわかるようにする事. なお, H と O の原子を結ぶ方向を z 方向とする. また, 酸素の 2s 軌道と水素の 1s 軌道はかなりエネルギーが離れているので, 両者の間の相互作用は無視できるとしても良い. (0.5 点)

(b) 作成した OH ラジカルの分子軌道に電子を書き入れよ. この分子は磁性(≒不対電子)を持つか？それとも非磁性(≒不対電子を持たない)か？(0.5 点)

(c) それぞれの軌道が, 結合性軌道, 非結合性軌道, 反結合性軌道のどれになるのかをわかるように示せ. (0.25 点)

(d) OH ラジカルの結合の次数を述べよ. (0.25 点)

(e) OH ラジカルの O-H 結合と比べ, 電子を一つ付け加えた OH^-(水酸化物イオン)の O-H 結合は強くなるか？弱くなるか？それともあまり変わらないと考えられるか？理由も述べよ(0.5 点)

(f) 逆に電子を一つ引き抜いた OH^+の結合の強さはどうなると考えられるか？理由も述べよ(0.5 点)

(g) 電子を二つ付け加えた OH^{2-}の場合はどうか？理由も述べよ(0.5 点)