

基礎現代化学(金5!増田) 第4章 復習問題

★基本

[1] $H + H^+ \rightarrow H_2^+$ の反応において、左辺(H原子と H^+ イオン)の全エネルギーは

各のエネルギーの和をとり、 $E_{左} = -13.60 + 0 = -13.60 \text{ [eV]}$

また、右辺の H_2^+ のエネルギーは、 $E_{右} = -16.39 \text{ [eV]}$ $\therefore E_{左} > E_{右}$

よって分子が形成されたことで全エネルギーが低下したと示せた。

[2] 放出されたエネルギーは

$E_{左} - E_{右} = -13.60 - (-16.39) = 2.79 \text{ [eV]}$ 結合エネルギー

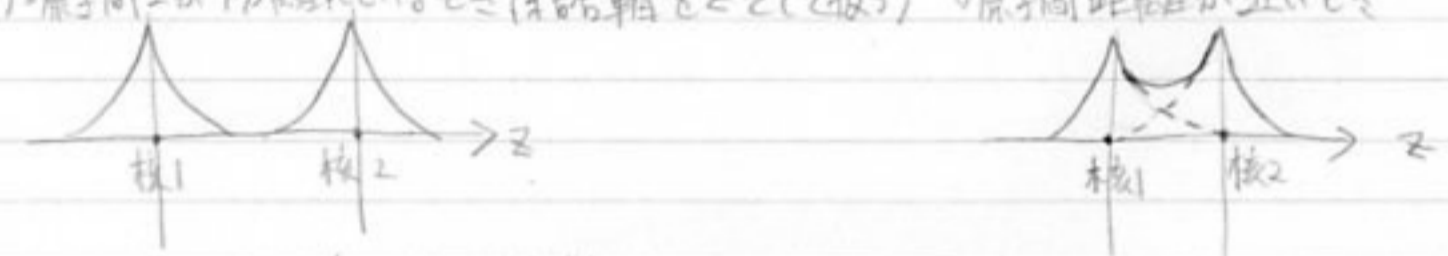
[3] [2]と同様に 2.79 [eV] , 解離エネルギー

—以下レポート課題範囲—

[4] 軌道相互作用の原理より、2個の1s軌道の線形結合で形成される分子軌道は結合性軌道と、反結合性軌道の2つ。よって H_2 の分子軌道は 2個 //

[5] 1s, 2s それぞれの軌道について、結合性と反結合性の分子軌道が形成されると考えられる。よって 4個 //

[6] (1) 原子同士が十分離れているとき(以下では結合軸をzとして扱う)の原子間距離が近いとき



(2) ψ_0^2 は電子の存在確率を表す関数であり、全空間の中に全ての電子が含まれているということを表している。

(3) 原子が規格化されているので $\int \phi_1^2 dV = \int \phi_2^2 dV = 1$ よって

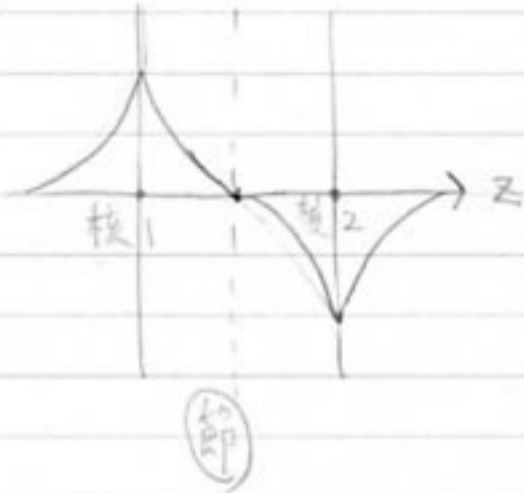
$$\int \psi_0^2 dV = 2N^2 + 2N^2 \int \phi_1 \phi_2 dV = 1 \quad \therefore \int \phi_1 \phi_2 dV = \frac{1}{2N^2} - 1 \quad 0 < \frac{1}{2N^2} < 1$$

(Nは明示は0でない)

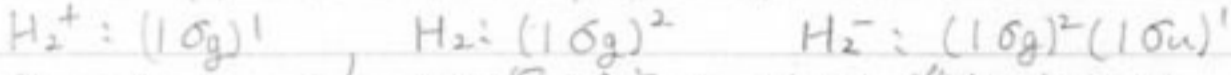
$$\underline{-1 < \int \phi_1 \phi_2 dV < 1}$$

(4) 波動関数が結合軸に関して対称である。

[7]



[8] エネルギー準位の低い結合性軌道から順に電子が入っていくので:



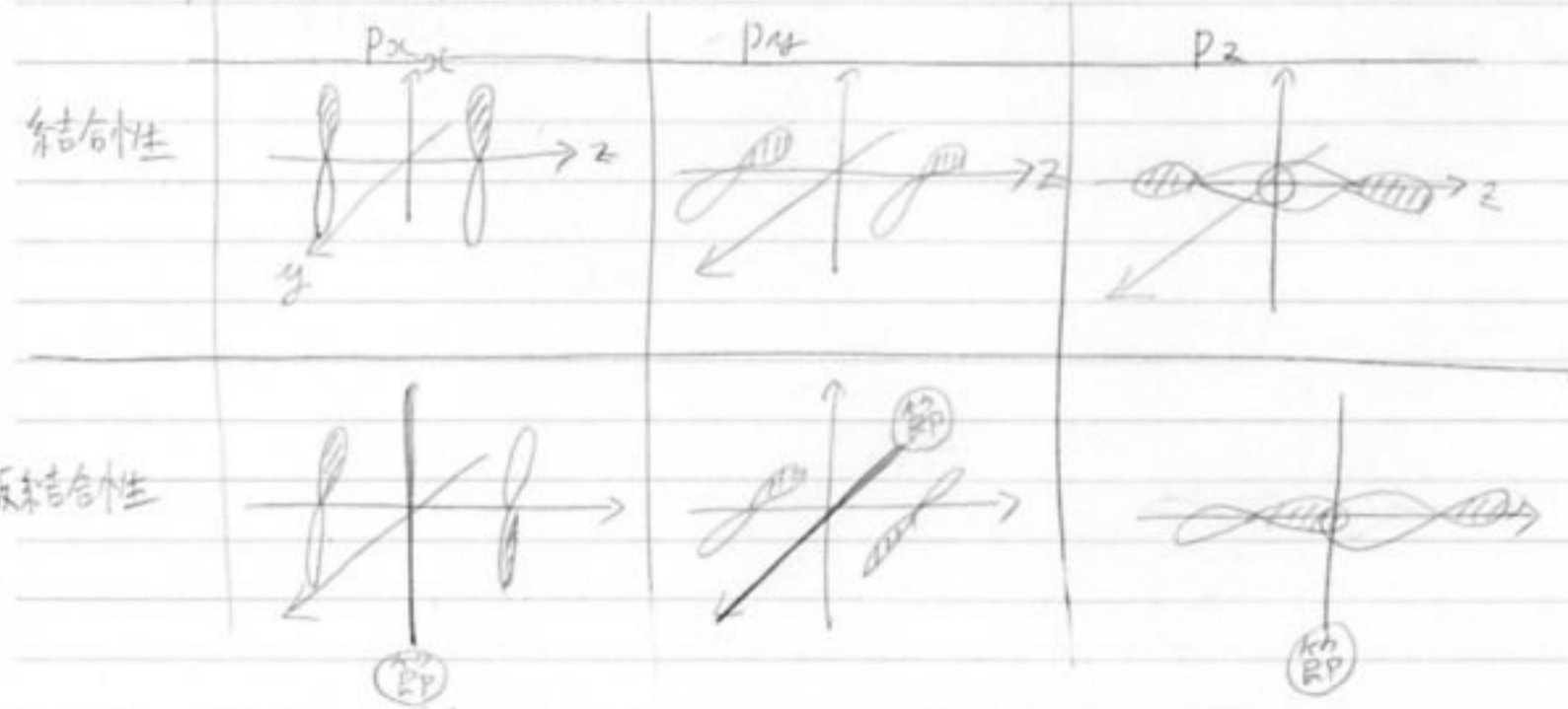
(結合エネルギーの大きい分子) = (最も安定した、エネルギー準位の低い分子)

結合次数がそれぞれ 0.5, 1, 0.5 となり最も結合次数の高い H₂ が最も結合エネルギーが大きい。

軌道相互作用の原理(2)より、原子間距離が短く結合性軌道に電子が含まれ反結合性に含まれないと安定した結合を形成。最も安定な結合である H₂ が原子間距離も最も短い。

[9] (1) 軌道相互作用の原理(1)より2つの原子にそれぞれ (p_x, p_y, p_z) の3つの原子軌道が存在する
 ∴ ことから、形成される分子軌道は 6個。

(2) 一の軌道相互作用をそれぞれ表記する。



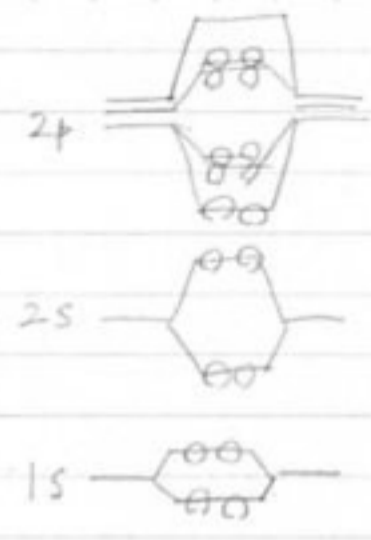
(3) p_zの結合性軌道 つまり 3σ_g

(4) z=0平面に関して対称(z軸をまわって180°回転すると符号が変化する)

(5) 異なる2つの状態が同じエネルギーを持つこと

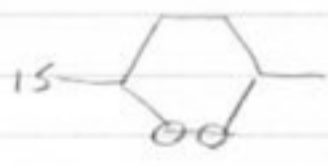
[10] F: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^5$

F₂ のエネルギー-軌道図は右図の通り。

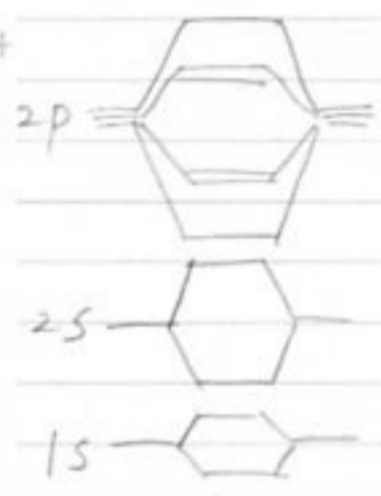


[11] He: $1s^2$ F₂

He₂ 分子軌道のエネルギー-軌道図は右の通り
結合性軌道に全ての電子が入り、不安定な状態
なので、結合弱くはエネルギー的に不安定な
励起状態を呈しなければならないため。



[12] 第2周期は 2p までの軌道が関与してくる。2p までのエネルギー-軌道図は下の通り



① 2s までしか電子が入っていないとき

$$\text{結合次数} = \frac{(\text{2sの結合性軌道の電子数}) - (\text{2sの反結合性})}{2} \leq \frac{2-0}{2} = 1$$

② 2p に電子が入っているとき

結合次数が最大するとき結合エネルギー最大より 結合性軌道に
最も多くの電子が入っていて、反結合性軌道に電子が入っていない時
結合エネルギー最大。これをみたす $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^3$ の電子配置
の原子は N. よって N₂ の結合は ① と ② の中で最も強い。

[13] O: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^4$ 各分子(イオン)の結合次数は

$$O_2^+ : \frac{6-1}{2} = 2.5 \quad O_2 : \frac{6-2}{2} = 2 \quad O_2^- : \frac{6-3}{2} = 1.5$$

結合次数最大 \Rightarrow 結合エネルギー最大 であり O₂⁺ が結合エネルギー最大である。

[14]
左が結合性軌道である。
理由: 右図は結合領域である2原子の間に電子の存在しない節が存在したため。