

構造化学 11 回目 中田 Quiz 略解

- 1.1. 平均場近似は、一つの電子に着目し、その他の電子のポテンシャルエネルギーを平均化して扱うという近似。
- 1.2. 平均場近似は、 N 電子の波動関数を 1 電子の軌道の N 個の積で書くという近似。
- 1.3. 多電子のシュレーディンガー方程式は解けないし波動関数の次元が高く、解の解釈がしづらいが、平均場近似を使うと、実用的に解けるようになるし、分子軌道を考えれば良いためわかりやすい。
- 1.4. 平均場近似を使うと N 電子系のシュレーディンガー方程式一本が、1 電子系のシュレーディンガー様方程式 N 本となる。その固有エネルギーをエネルギー順位、固有波動関数を分子軌道とよぶ。
2. 軌道エネルギーの差が大きすぎるため。本来は 1s と 2s 軌道は線形結合を作っているが、たとえば 1:1000 の割合で混ざっているため、混ざらないように見える。
3. s 軌道と p 軌道の対称性が違うため、混ざらない
4. σ 、 σ^* 軌道は、分子軸での任意の回転に対して対称である。分子の midpoint で節を持たない場合は σ 軌道(結合性軌道)、分子の midpoint で節を持つ場合は σ^* 軌道(非結合性軌道)。図 <https://www.youtube.com/watch?v=cjFFAu6gvRA>, https://www.youtube.com/watch?v=NmU_GFo4G2 参照のこと
5. π 、 π^* 軌道は、分子軸での 180° の回転に対して対称となる。分子の midpoint で節を持たない場合は π 軌道(結合性軌道)、分子の midpoint で節を持つ場合は π^* 軌道(非結合性軌道)。図は <https://www.youtube.com/watch?v=keQ7rscEjoU> <https://www.youtube.com/watch?v=juzZO3NEgDw> 参照

6. 下図がエネルギーダイヤグラムとなる。正確には、 B_2 C_2 N_2 では $3\sigma_g$ が $1\pi_u$ よりエネルギーが上になる(こんな瑣末なことは覚えなくて良い)。

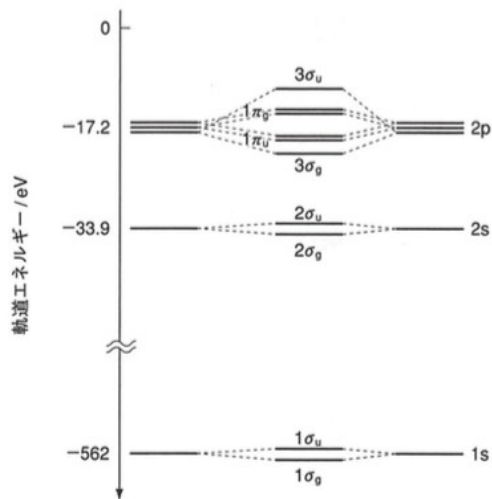


図 9.19 酸素分子の分子軌道の形成

2 個の酸素原子が近づいて、相互作用により原子軌道から分子軌道が形成される。

電子配置

7. H_2 , He_2 , Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Ne_2 の結合次数はそれぞれ、1, 0, 1, 0, 1, 2, 3, 2, 1, 0、磁性は B_2 O_2 のみもつ。