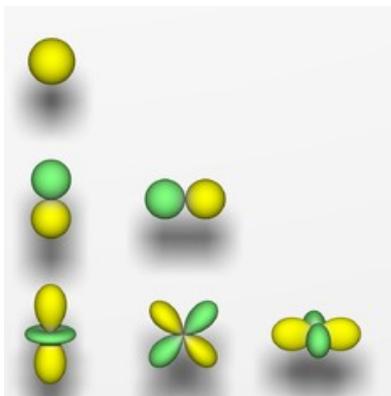


構造化学 Quiz 8回目 中田

1. [必須] s, p, d 軌道の概形を示せ。節面について説明せよ。



s 軌道は節面を持たない。

p 軌道は節面を一つもつ。それぞれ x,y,z 平面。

d 軌道は節面を 2 つ持つ。dz²は、xz, xy 平面で、
2 つの節面が直角に交わっている

3. 関数 $Y(\theta) = 1$ は円となる $Y(\cos \theta)$ は原点を挟んで円 2 つ、だが、 $\cos \theta \leq 0$ のところ、つまり $\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{3\pi}{2}$ では $r \leq 0$ となる。そのため点線などでプロットするとよい。

4. p 軌道の形に由来している。酸素の px py, pz どこか 2 つの軌道に水素が結合するから。また、2p 軌道の動径関数の極大点は、2 ボーア = 1.06Å。一方 H-O 距離は 0.957Å とかなり一致している(本当はもう少し真面目にやらなければならないが、だいたい ok)。

分子軌道は、以下の URL から。

http://nakatamaho.riken.jp/kouzoukagaku/jsmol/water_mo.html

5. 1s 状態で、電子は平均して核からどの程度離れているかを求めよ

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} |R_{1,0}|^2 r^3 dr = \frac{4}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr = \frac{3}{2} a_0$$

ボーア半径は a_0 で、それは電子の存在が極大になる半径となっている。