化学第二 講義プリント　９－Ａ	担当　**真島**

演習問題 8 の略解

略解 8-1 異核二原子分子の双極子モーメント

ここでは、異核二原子分子において電荷のかたよりが大きく、原子bが負に帯電すると仮定しているので、イオン結合性を示す波動関数を、$\Psi_{ion} = \psi_b(1)\psi_b(2)$と仮定している。

共有結合の波動関数Ψ_{cov}とイオン結合の波動関数Ψ_{ion}のそれぞれが規格化されている場合、

イオン結合性の割合は$\dfrac{c^2\int\delta^2\Psi_{ion}{}^*\Psi_{ion}dv}{\int\Psi^*\Psi dv} = \dfrac{\delta^2}{1+\delta^2}$となり、

共有結合性の割合は$\dfrac{c^2\int\Psi_{\mathrm{cov}}{}^*\Psi_{\mathrm{cov}}dv}{\int\Psi^*\Psi dv} = \dfrac{1}{1+\delta^2}$となる。

最外殻電子で化学結合に寄与する二個の電子が双極子モーメントを形成するので、原子 a 上の電荷量と原子 b 上の電荷量の和は$2e^-$となる。ただし、e^-は単位電荷（-1.602×10^{-19} (C)）。共有結合に寄与する電荷量とイオン結合に寄与する電荷量の和から、e^-を引いたものが、各原子における電荷量のかたよりに相当するものとなる。

したがって、下の表より、双極子モーメントは$\dfrac{\delta^2}{1+\delta^2}e^-R$となる。

	共有結合性	イオン結合性	共有＋イオン (A)	等核二原子分子 (B)	(A)−(B)
原子 a 上の電荷量	$\dfrac{1}{1+\delta^2}e^-$	0	$\dfrac{1}{1+\delta^2}e^-$	e^-	$\dfrac{-\delta^2}{1+\delta^2}e^-$
原子b上の電荷量	$\dfrac{1}{1+\delta^2}e^-$	$\dfrac{2\delta^2}{1+\delta^2}e^-$	$\dfrac{1+2\delta^2}{1+\delta^2}e^-$	e^-	$\dfrac{\delta^2}{1+\delta^2}e^-$

略解 8-2 異核 2 原子分子としての弗酸（HF）と塩酸（HCl）の比較

	双極子モーメント μ (D)	原子核間距離 R(nm)	電荷 $\dfrac{\delta^2}{1+\delta^2}e^-$ (C)	$\dfrac{\delta^2}{1+\delta^2}$ (個)	δ
弗酸（HF）	1.83	0.092	6.62×10^{-20}	0.41	0.83
塩酸（HCl）	1.11	0.127	2.91×10^{-20}	0.18	0.47

双極子モーメントμ (D) $\times3.33\times10^{-30}=\dfrac{\delta^2}{1+\delta^2}e^-$Rより、電荷のかたより$\dfrac{\delta^2}{1+\delta^2}e^-$は上記の表のように求められる。

この電荷のかたよりを単位電荷 e=1.602×10^{-19} (C)で割ると、かたよって存在している電子の割合（個数）が求められる。

表からも明らかなように、弗酸の方が、塩酸よりも電荷のかたよりとδが大きく、イオン状態の割合が大きくなることが分かる。したがって、弗酸のδ_{HF}は塩酸の値δ_{HCl}よりも大きい。

・双極子モーメントの単位、[Cm]の意味

双極子モーメントは、長さR [m]の棒の両端に＋qと－q [C]の電荷が存在するようなイメージです。

（上記のように、＋qと－qの電荷は各原子における結合後の電荷量から結合前の電荷量を差し引いた値です）

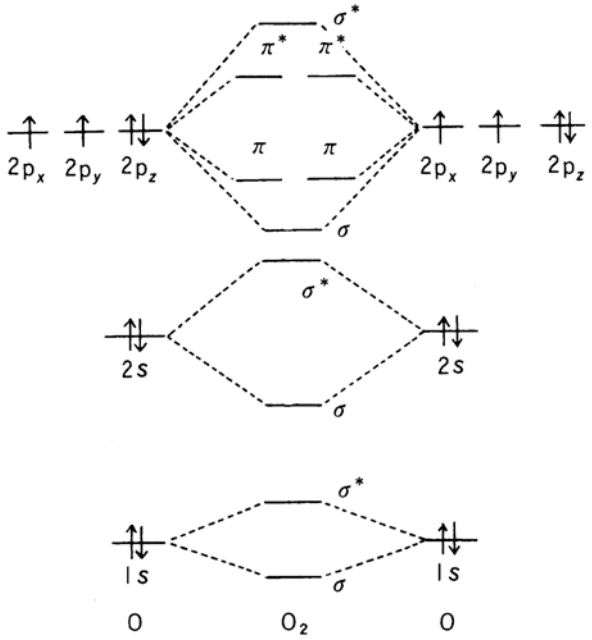
化学第二 講義プリント　９－Ｂ	担当　**真島**

・HF の双極子モーメントは HClの双極子モーメントより大きいにも関わらず、HF は弱酸、HCl は強酸、何故？。

弗酸の分子は双極子モーメントが大きいが故に水中では、HF 分子が数珠繋ぎ（H-F・H-F・H-F・H-F）につながる（この（・）であらわされている結合は水素結合）。このように、弗酸の分子は弗酸の分子と水素結合することによって水中で安定化するため、水中で H^+と F^-に解離しにくく弱酸となる。一方、塩酸は水溶液中では、ほぼ100％解離する強酸です。このように塩酸では、イオン性が大きいためにイオン化しやすく、イオン化した H^+と Cl^-は水分子によって取り囲まれて安定化するため、100％解離すると考えられます。

演習問題９

9-1　二つの酸素原子 O が結合して酸素分子 O_2が形成される際の電子エネルギー準位は、右図のように与えられる。この図を参考にして次の問いに答えよ。



9-1-1　2p軌道は、σ分子軌道とπ分子軌道の双方を形成する。このとき、π分子軌道は何重に縮退しているか答えよ。

9-1-2　酸素分子 O_2の分子軌道の電子占有状態を右図に矢印を書き入れることによりあらわせ。
（スピンの上下も区別すること）

9-1-3　前問で答えたように、酸素分子においては結合性軌道（σ、π軌道）のみではなく、反結合性軌道（σ*、π*軌道）にも、電子は存在する。反結合性軌道に電子が存在するにも関わらず、酸素分子は安定に存在する理由を述べよ。

9-2 原子の原子価について下記の表の空欄に適当な数字を入れよ。

原子	H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
原子価										

9-3　二原子分子の2p軌道において、σ結合とπ結合がそれぞれ形成される場合を考えよ。

9-3-1　σ軌道とπ軌道における電子分布状態をあらわす概念図をそれぞれ書きなさい。

9-3-2　σ結合を形成する際の重なり積分（$\int \psi_a^* \psi_b dv$）と、π結合を形成する際の重なり積分は、どちらの方が大きくなるか答えよ。また、その理由を説明せよ。

9-3-3　σ軌道の結合性軌道と反結合性軌道のエネルギー差と、π軌道の結合性軌道と反結合性軌道のエネルギー差は、どちらの方が大きいと予想されるか答えよ。またその理由を説明せよ。