

[物理化学基礎]

化学が対象とする原子，分子現象を正しく理解するためには，量子論の導入が不可欠である．二つの原子 X_A と X_B が共有結合を形成して，等核 2 原子分子 X_2 が生成する場合を例として考えてみよう．LCAO-MO 法によれば，二つの原子の原子軌道 ψ_A と ψ_B から，二つの分子軌道 $\psi_A + \psi_B$ と $\psi_A - \psi_B$ が生じる．これら二つの分子軌道は，主として原子間の相互作用のために異なるエネルギー E_+ と E_- を持つ．原子間の相互作用は，原子核間の反発，原子核と電子間の引力，電子間の反発からなるが，ここでは電子間の反発を無視した 1 電子近似を採用する． X_A と X_B 間の距離 r_{AB} をパラメーターとして変化させながら分子軌道エネルギー E を求めると，原子間相互作用が r_{AB} に依存して変化するため， E_+ と E_- はそれぞれ異なる r_{AB} 依存性を示し，二つの異なるエネルギー曲線 $E_+(r_{AB})$ と $E_-(r_{AB})$ が得られる．図 1 は，エネルギー曲線 $E(r_{AB})$ を模式的に描いたグラフである．以下の設問に答えよ．

- (1) LCAO-MO のフルスペリングおよびその日本語訳を記せ．
- (2) 二つの分子軌道 $\psi_A + \psi_B$ と $\psi_A - \psi_B$ はそれぞれどのように呼ばれるか．
- (3) エネルギー曲線 $E(r_{AB})$ において， $r_{AB} \rightarrow 0$ および $r_{AB} \rightarrow \infty$ の極限におけるエネルギーの値はそれぞれどのような要因によって決まるか．
- (4) 図 1 と同じ図を解答用紙に描き，そこにエネルギー曲線 $E_+(r_{AB})$ を描け．
- (5) エネルギー曲線 $E_+(r_{AB})$ を用いて，共有結合が形成される機構を 150 字以内で説明せよ．ただし，電子間の反発を考慮に入れること．
- (6) 共有結合形成の機構を説明するうえで，量子論がどのような役割を果たしているかを 50 字以内で述べよ．
- (7) 「共有結合の形成」と同様，量子論でなければ説明できない化学現象を一つとりあげ，それが量子論によってどのように説明されるかを 150 字以内で述べよ．

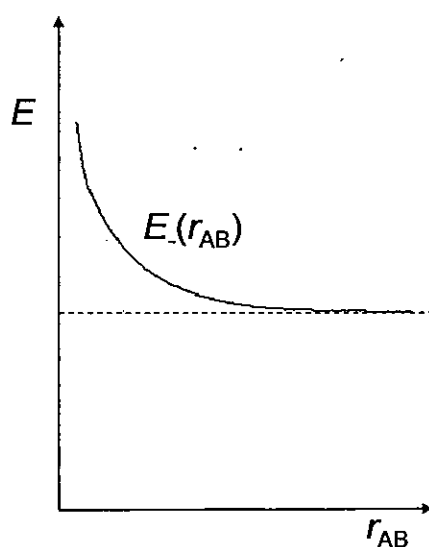


図 1