

分子構造論 (20100421) M: 以下は宮本のコメント

**08s3002:** 粒子が消滅するのはどのようなときですか？ エネルギーが大きすぎると消滅するのでしょうか？ M: 粒子の種類とエネルギーとによるような気が... ただしエネルギーと質量は等価なので ( $E = mc^2$ ), 質問のように高エネルギーの時に消滅するというわけではないと思う。しかし素粒子など, 高エネルギーで衝突させて, 色々な事が起こるわけで... 詳細は素粒子物理の本でも読んでみてはいかがでしょう。

**08s3011:** 光や X 線は波と量子性がありますが, 量子性があるのに光など X 線などの結晶は存在しないのですか？ それとも作ることは可能ですか？ どのような方法を用いたら可能にできますか？ M: “光の結晶”なんて, とっても詩的で何か素敵ですね :-) でも光子は光速で運動しているので, 捕まえて結晶に固定するのは難しそうですね。できた結晶も光速で飛んでいってしまう?!

**08s3017:** 混成軌道の結合角は, 教科書に載っていません。混成軌道によって, 結合角は固有の値を持ちますか？ 持つなら, 角度から形を推定できたりもできそうですが... M: 例題 10.4 など, まさに混成の程度 (s 性) を評価することによって, 結合角がわかると言っています！

// [紙幅に余裕があるのでオマケ] 電子常磁性共鳴法 (EPR) では, 電子スピンと核スピンとの相互作用の程度を超微細結合定数 (hyperfine coupling constant) として測定します。これを詳細に解析すると, s 軌道にあるスピンの寄与と p 軌道にあるスピンの寄与とに分けることができます。即ち, 混成軌道における s 性を見積もることができ, これは分子構造に関する有用な情報となります (!)

**08s3021:** 分子オービタルを行列で表現することの, 一番オイシイ点は何ですか。 M: 量子力学の表現の一方の雄であるのが “行列力学” です。多数の数値の並びというものを, まとめて一つのベクトルや行列として表現できると, 概念の把握が楽になると思います。そして線形代数という強力なツールを利用できます。そこで解くべき問題は, 線形代数レベルで成分や要素の値を求めることに還元されます。このような行列計算は, 数値計算法の一大分野であって, その成果を存分に活用できます。

**08s3032:** 量子化したとき変化が連続的ではなく離散的であることは, 関数が時間と距離について表すとき, 時間が連続的なとき, 量子化している物は瞬間移動できると考えられませんか。 M: ミクロな粒子は古典的な意味での軌跡とはとらない訳だが, じゃあ瞬間移動しながらびょんびょんと移動していくのも, ある種の確定した軌跡と言えるのではないかなあ。ある瞬間にどこに居て, 次の瞬間にどこに居るかを予言できるのだから。

**08s3040:** もし, 素粒子であるクォークやレプトンを陽子から取り出すことができるとしたら, どのようなことに利用できますか？ M: 利用法について, いくらでも好きなだけ, 自分で新たに開発すれば良いのではないのでしょうか？

**08s3043:** 無機で「共有結合と非共有電子対」や「共有結合同士」, 「非共有電子対同士」が互いを遠ざける話がありましたが, これらの遠ざける力が違うのはなぜですか？ M: VSEPR (Valence-Shell Electron Pair Repulsion model, 原子価殻電子対反発モデル) の話ですね。シュライバーの無機化学によると, 基本の修正として, 反発力の大小は次の通りとなっています。

孤立電子対と孤立電子対 > 孤立電子対と結合領域 > 結合領域と結合領域

その理由として, “初等的な本では, 孤立電子対間の反発が強い理由として, 孤立電子対の方が結合電子対よりも平均して核の近くにあるから, 他の電子対を強く反発するのだらうと説かれているが, 本当の理由ははっきりしない” と述べています。正直ですね。一方, コットン&ウィルキンソンの無機化学では, 非共有電子対は共有電子対よりも空間的に広がっていることから, 反発が大きいと説明しているようです。このあたり, もともと定性的な説明なので, しょうがないのではないのでしょうか。マッカーリ&サイモンの物理化学では, 10.3 節で Walsh の相関図を用いて, もう少し定量的な話をしています。

**08s3045:** 二種類の成分 A と B の濃度が等しい混合物では, A と B の各々の沸点の他に共沸点が現れるそうです。これは, 各々の沸点より高い「最高共沸点」と, 各々の沸点より低い「最低共沸点」が存在します。これは成分によってどちらかになるそうですが, 何故高いものと低いものの 2 種類があるのでしょうか？ M: “共沸”とは, どのような現象ですか？ そのとき分子間の相互作用はどうなっているのでしょうか？

**08s3046:** BeH<sub>2</sub> は直線形の構造を持つが, H<sub>2</sub>O は折れ線形の構造を持っているのは, なぜなのでしょう。 M: このあとの 10.2 節 (混成オービタル), 10.3 節 (Walsh の相関図) を参照。他に VSEPR モデルでも説明可能。

**08s3049:** 混成オービタルは誰がどのようなきっかけで見つけた (思いついた) のですか？ M: ライナス・ポーリング (Linus Pauling) に聞いてみたらいかがでしょうか ;-)

**07s3032:** 粒子が  $0 \leq x \leq a$  の領域に閉じこめられているとき,  $\int_0^a \psi^*(x)\psi(x) dx = 1$  と規格化できますが, x の領域を  $0 \leq x \leq a/2$  と半分にしたら  $\int_0^{a/2} \psi^*(x)\psi(x) dx = \frac{1}{2}$  と単純に 1/2 倍できますか？ M: 状況が漠然としていてサッパリわかりません。領域内のポテンシャルはどうなっているのでしょうか。さらに “半分にする” とは, どのようなことですか？ 粒子の動ける範囲を半分にするのか, 粒子があるかどうか探す領域を半分にするのか？ 前者であれば, 当然, 当該領域内に必ず粒子は存在するので, 波動関数はその範囲内で規格化されなければならない。一方後者であれば, ポテンシャルに応じた波動関数によって, 粒子の存在確率は求められることになる (必ずしも 1/2 になるとは限らない)。