

プログレス物理化学 II (20121019) M: 以下は宮本のコメント

10s3003: 立体視で分子の構造をみたりしますが、どのようなしくみで立体的にみえるでしょうか。自分でも簡単につくれるのでしょうか。 M: 単眼の右目と左目とは、実は微妙に異なる景色を見ています。それを頭の中で合成して認識することにより、立体視していると言われていました。そこで、右目用と左目用の画像の二つの画像を用意し、それぞれの目に見せるようにすることで、平面の図像であるにもかかわらず立体的に感じることができます。カメラで写真をとる場合には、カメラを二台並べて撮影することになりますが、CG などでは視点を横に少しずらした二つの画像を描かせることとなります。分子構造のデータ (PDB 形式のファイルなど) を表示する PC のソフトには、そのような 3D 表示させる機能があるものもあります。

10s3008: 等核二原子分子と異核二原子分子において、1s 軌道が化学結合に関与しない場合、エネルギーは変化するのですか? (例) HF の F と F₂ の F の 1s 軌道ということです。 M: 化学結合に関与しない、すなわち相手原子の AO との相互作用がない場合には、エネルギーが変化する理由がありません。しかし現実には、ごくわずかとはいえ原理的に相互作用はあるので、非常にわずかながらエネルギーは変化しているものと思われま。章末問題 9.28 によれば、まさに HF と F₂ における F の 1s 軌道について、そのイオン化エネルギーが 66.981 MJ/mol と 67.217 MJ/mol のように異なることを示しています。Cox の本にある解答では、その原因を F 上の電子密度が異なり核の電荷の遮蔽の程度が異なるからだとしていますが、これは別の言葉で言えば、電子を感じるクーロンポテンシャルが異なるということであり、すなわち軌道エネルギーが異なることとなります。

10s3010: 引力はなぜ働くのでしょうか。// 分子の構造を調べる方法として何があるのでしょうか。 M: 赤い糸で結ばれた二人は離れられません、これは二人の間に引力が働いているとみなすことも出来ます。一方でそのような直接の接触がなくても、キャッチボールを続けていれば、これまた二人は容易には離れられません。現在知られているいわゆる四つの力 (電磁気力、弱い核力、強い核力、重力) は、いずれも力が働く二つの粒子間で、それぞれの力を媒介する粒子が交換されているという風に理解されています。素粒子の中のゲージボソンといわれるグループの粒子がそれです。// もちろん見るためには、分子に光を当てて、透過または反射 (散乱) されてきた光を検出します。各種の分光学的方法や回折法ですね。

10s3018: H₂, D₂, H-D で 結合エネルギーは変わりますか? もし変わるとしたら、なぜですか? M: 化学的性質は同位体間で変わりがないと、初級の化学では習います。し

かし量子化学を勉強した私たちは、持っているはず。それはつまり、結合状態をあらわす曲線のポテンシャルエネルギーとの差が解離エネルギーです。対してどのように振る舞うでしょう。

10s3020: 異核二原子分子の LiF の話あったのですが、大きい値だとどういった評価です。そこで、原子・分子ででしょうか。1 eV = 96.48 kJ/mol 結合エネルギーがそれぞれ 105 kJ/mol あります。

10s3023: 工場事故などで、薬品の取り扱いです。研究室でこのような事故はとられていますか? M: 使う人かなどを把握するようにするか? MSDS を適宜参照できるようにし

10s3026: ポーリングの電気陰性度の $\sqrt{D_{AA}D_{BB}}$ [D_{AB} 等の説明は省略と同じ意味になるのですか? M: Δ_{a-b} を結合エネルギーの実測値を

10s3028: 混成軌道で、2p から 1 つ 2p_z に移す?? M: 2p から 2p_z に移す??

10s3029: 混成軌道は sp³, sp², sp 混成軌道なら pd 混成ということは可能なんですか? も重要ですが、対称性もまた重要で、p と d との混成を含む四面体面四角形構造の中心原子の混成状態

10s3036: 時間に依存するシュレーディンガー方程式か。 M: § 4.4 をよく読め。

09s3040: 教科書には sp 混成軌道の例として初めて混成軌道の概念を思いついた人か。 M: 初めて思いついた人には