

Q1.

AlCl₃ の点電子構造は Al がオクテットになっていません。点電子構造の描き方の

5段階目を適用すれば、3つの塩素と共鳴構造になると考えられると思うので

すが何故違うのでしょうか。

A1. Al がオクテットになりたがるのと Cl が二重結合になりたがらないのどちらを優先するかと言う話で、ハロゲンの二重結合はできにくいということです。3族の B と Al はオクテットよりも電子が少なくても耐えられる（エネルギー損が少ない）傾向があり、ルイス酸として触媒などとして使われます（化学 II）。似たものとして、BF₃ と AlCl₃ だけを覚えておけば十分です。

Q2.

分子軌道法における、エネルギー準位のダイヤグラムの図を見ると、 σ や π という

文字があります。これは原子軌道法における σ 結合や π 結合と何か関係しているの

でしょうか。関係していない場合、その文字の意味はなんなのでしょうか。

A2. σ 、 π の意味は共通です。波動関数の形を図示するのは面倒なので、特徴を字で表しています。 σ は、2原子の結合線を含む節面がない、 π は2原子の結合線

を含む節面が1つと言う意味です。

Q3.

Q2. の質問の回答が関係しているであった場合、酸素分子 O₂ において二重結合を

している σ 結合と π 結合は、ダイヤグラムの図でいうとどの軌道に当てはまるので

でしょうか？酸素分子のダイヤグラムの図では、 $\sigma 2s$ 、 $\sigma 2p$ がそれぞれ1つずつ、 π

$2p$ が2つあります。そのうちの二つの軌道が二重結合に使われるのでしょうか。

また、原子軌道法における、非共有電子対という概念は、分子軌道法においては

どれに当てはまるのでしょうか。

A3.

$\sigma 2s$ は、 $2s$ 軌道のエネルギーが低いため結合性軌道と反結合性軌道の両方に電子が詰まります。 $\sigma 2p$ と $\pi 2p$ は、結合性軌道のみ電子が詰まります。 $\pi 2p$ は、結合方向を x とすると、 $2p_y$ と $2p_z$ 由来の軌道から結合性軌道が2つできます。酸素の場合はそこに電子が2個詰まるので、フント則が働きスピンのそろいません。

Q4.

ハロゲンの色の変化についてです。過去問題で

「原子間距離が大きくなると、結合性軌道を作ることによるエネルギー安定化が

減るとともに判読合成軌道を作ることによるエネルギー不安定化も減ることによ

り、 ΔE が小さくなることに起因している。」

との説明があったのですがイマイチ分かりません。特に、なぜ原子間距離が大き

くなると、結合性軌道を作ることによるエネルギー安定化が減るのでしょうか。

A4.

原子間距離が大きくなると、原子軌道の重なりが減ります。すると、電子が原子間を

動き回るときに電子雲が薄いところを通ることになるので、動き回る頻度が少

なり、エネルギー安定化が減ります。このあたりから、シュレディンガー方程式を

使って説明した方がわかりやすくなりますが、それは2年生以降の楽しみにとっておいてください。