

- [1] 次の事項を説明せよ。
 a) 結合性分子軌道・反結合性分子軌道 b) 結合次数
 c) σ 結合・ π 結合 d) 共鳴
 e) 結合解離エネルギー f) 双極子モーメント
- [2] (1)(2) の分子軌道のエネルギー準位図を書きなさい。続いて電子を配置しなさい。原子軌道AOの軌道名 ($1s, 2s, 2p \dots$) と分子軌道MOの軌道名 ($\sigma_{1s}, \sigma_{1s}^*, \pi_{px} \dots$) なども記すこと。
 (1) Li_2
 (2) F_2
- [3] 次の間に答えなさい。
 (1) $\text{O}_2, \text{O}_2^+, \text{O}_2^-$ 分子イオンのそれぞれの結合次数を求めなさい。
 (2) 3つのO-O間距離を結合次数から判断して長い順に並べなさい。
 その理由も述べなさい。
- [4] 混成軌道に関する下の間に答えなさい。
 (1) アンモニア NH_3 の立体構造を図で表し、混成軌道の考え方をを用いて説明しなさい。
 (2) BeCl_2 の構造が、直線型になることを混成軌道を使って説明しなさい。
- [5] アミド結合 $-\text{NH}-\text{CO}-$ もつ化合物をアミドという。ナイロンなどのポリアミド系合成繊維の強度が高くなる理由を図などを使って説明しなさい。
- [6] 一般に AB 二原子分子の結合エネルギーは AA および BB 等核二原子分子の結合エネルギーの相加平均より大きくなる。次の分子のうちでこのずれが大きいのはどれか。それはなぜか。
 $\text{NO}, \text{CO}, \text{HF}, \text{HBr}, \text{IBr}, \text{ICl}$
- [7] CsCl の核間距離は 2.90 \AA であり、その双極子モーメントは 10.5 D である。この分子のイオン性を求めよ。
- [8] NO および NO^+ の分子軌道は次のように表される。ただし軌道エネルギー準位の高低を $<$ や $=$ で示している。次の問(a), (b)に答えよ。

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2px} = \pi_{2py} < \sigma_{2pz} < \pi_{2px}^* = \pi_{2py}^* < \sigma_{2pz}^*$$

 (a) NO および NO^+ の電子配置をそれぞれ例にならって示せ。
 例: $\text{H}_2 \quad \sigma_{1s}^2$
 (b) NO および NO^+ の結合次数を求めよ。さらにどちらの結合が強いか述べよ。
- [9] 一般に、金属は、温度上昇にともなって電気伝導率は低下して、電流は流れにくくなる。一方、半導体は、温度が上昇するにつれて、電気伝導率は上昇する(右図参照)。この違いについて、200字程度で説明しなさい。

