

化学結合と構造 試験問題

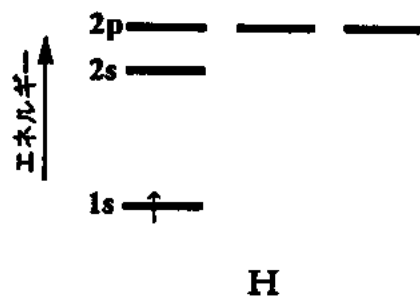
H13年度 E2クラス 石田

【1】簡潔に説明せよ。必要ならば図を用いてよい。

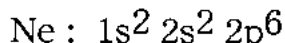
- 1) パウリの排他原理
- 2) フント則
- 3) 規格化定数
- 4) 光電効果
- 5) VSEPR

【2】原子と周期表に関する以下の問いに答えよ。

(a) 水素原子 H の基底状態では、電子が右図のように原子軌道を占有する。炭素原子 C と酸素原子 O の場合について、電子の占有の様子をそれぞれ右図のように図で答えよ。なお、 \uparrow 、 \downarrow は電子のスピン量子数がそれぞれ $+1/2$ と $-1/2$ であることを示す。



- (b) 炭素および酸素の原子価はそれぞれいくつか。メタンと水（それぞれ炭素と酸素の水素化物）の分子構造を、立体的に描け。
- (c) 設問 (b) の分子構造を、右上図のような電子配置図を用いてそれぞれどのように説明できるか。
- (d) ネオン原子 Ne の基底状態の電子配置を以下のように表記する。

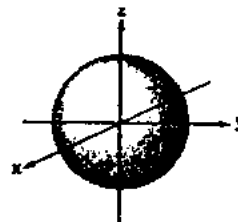


塩素原子 Cl、カルシウム原子 Ca、亜鉛原子 Zn の基底電子配置を、この表記法にならって答えよ。

- (e) Cl, Ca, Zn がとりうる安定なイオンはなにか答えよ。また、イオンの電子配置にはどのような特徴があるかを記せ。
- (f) 周期表では、族の番号を右に進めるにしたがって、原子の第一イオン化エネルギー（イオン化ポテンシャル）はどのように変化するか。また、周期を下におりるにしたがってそれはどのように変化するか。それぞれ理由も簡潔に記せ。

【3】共有結合に関する以下の問いに答えよ。

(a) $1s$ 軌道の電子の広がり様子は、右図のように模式的に表現される。同様に $2p_z$ 、 $3d_{yz}$ 軌道の電子の広がりを xyz 座標系を使って描け。



(b) 水素分子 H_2 の共有結合の形成は、分子軌道法により下図のように説明される。水素分子では、2つの水素原子の $1s$ 軌道から2つの分子軌道 σ と σ^* が形成される。そのエネルギー準位と基底状態での電子の占有を示したものが右下図である。

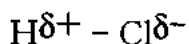
分子軌道 σ と σ^* の名称を答えよ。

(c) 水素分子 H_2 、およびその陽イオン H_2^+ 、陰イオン H_2^- の結合次数を答えよ。また、三者の安定性の順序を答えよ。

(d) ヘリウム分子 He_2 は、なぜ存在しないのかを分子軌道を使って説明せよ。

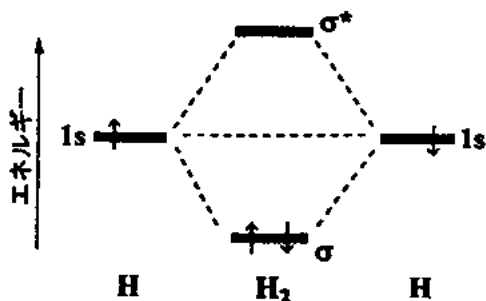
(e) 2p 軌道からも σ と σ^* が形成される。2原子間における2つの2p軌道の重なり方および位相がわかるように、その様子を図示せよ。さらに、2p軌道からは π と π^* も形成される。同様にその様子を図示せよ。

(f) 異なる元素の原子間の共有結合は分極した性質を持つ。たとえば $H-Cl$ では、電気陰性度の違いにより以下のような部分電荷を用いて結合の分極を表現できる。



ここで、 δ は、0より大きく1より小さいある値である。以下の分子について、共有結合の極性を上記にならって答えよ。

- (1) $Na-H$ (2) CH_3MgBr の $C-Mg$ 結合 (3) $CH_3-CO-CH_3$ の $C=O$ 結合



【4】 結晶の性質について問う。

ドライアイス (分子式 CO_2) は昇華性があるが、食塩 (組成式 $NaCl$) やダイヤモンド (組成式 C) には昇華性がない。食塩は $800^\circ C$ で融解するが、ダイヤモンドはその温度でも融解しない。これについて知るところを述べよ。

参考)

元素の周期表 (4桁原子量)

周期	族																		周期		
	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII			IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIA	0			
1	1 H 1.008 水素																	2 He 4.003 ヘリウム	1		
2	3 Li 6.941 リチウム	4 Be 9.012 ベリリウム	凡例 原子番号 → 20 原子量 (4桁) → 40.08 Ca → 元素記号 カルシウム → 元素名										5 B 10.81 ホウ素	6 C 12.01 炭素	7 N 14.01 窒素	8 O 16.00 酸素	9 F 19.00 フッ素	10 Ne 20.18 ネオン	2		
3	11 Na 22.99 ナトリウム	12 Mg 24.31 マグネシウム											13 Al 26.98 アルミニウム	14 Si 28.09 ケイ素	15 P 30.97 リン	16 S 32.07 硫黄	17 Cl 35.45 塩素	18 Ar 39.95 アルゴン	3		
4	19 K 39.10 カリウム	20 Ca 40.08 カルシウム	21 Sc 44.96 スカンジウム	22 Ti 47.88 チタン	23 V 50.94 バナジウム	24 Cr 52.00 クロム	25 Mn 54.94 マンガン	26 Fe 55.85 鉄	27 Co 58.93 コバルト	28 Ni 58.69 ニッケル	29 Cu 63.55 銅	30 Zn 65.39 亜鉛	31 Ga 69.72 ガリウム	32 Ge 72.59 ゲルマニウム	33 As 74.92 ヒ素	34 Se 78.96 セレン	35 Br 79.90 臭素	36 Kr 83.80 クリプトン	4		
5	37 Rb 85.47 ルビウム	38 Sr 87.62 ストロンチウム	39 Y 88.91 イットリウム	40 Zr 91.22 ジルコニウム	41 Nb 92.91 ニオブ	42 Mo 95.94 モリブデン	43 Tc 101.1 テクネチウム	44 Ru 101.1 ロジウム	45 Rh 106.3 パラジウム	46 Pd 106.4 パラジウム	47 Ag 107.9 銀	48 Cd 112.4 カドミウム	49 In 114.8 インジウム	50 Sn 118.7 スズ	51 Sb 121.8 アンチモン	52 Te 127.6 テルル	53 I 126.9 ヨウ素	54 Xe 131.3 キセノン	5		
6	55 Cs 132.9 セシウム	56 Ba 137.3 バリウム	57-71 **	72 Hf 178.5 ハフニウム	73 Ta 180.9 タンタル	74 W 183.9 タングステン	75 Re 186.2 レニウム	76 Os 190.2 オスミウム	77 Ir 192.2 イリジウム	78 Pt 195.1 白金	79 Au 197.0 金	80 Hg 200.6 水銀	81 Tl 204.4 タリウム	82 Pb 207.2 鉛	83 Bi 209.0 ビスマス	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)	6		
7	87 Fr (223)	88 Ra (226)	89-103 **																	104 Lu (260)	7

* ランタノイド	57 La 138.9 ランタン	58 Ce 140.1 セリウム	59 Pr 140.9 プラセオジム	60 Nd 144.2 ネオジム	61 Pm (145)	62 Sm 150.4 サマリウム	63 Eu 152.0 ユウロピウム	64 Gd 157.3 ガドリウム	65 Tb 158.9 テルビウム	66 Dy 162.5 ジスプロシウム	67 Ho 164.9 ホウメイト	68 Er 167.3 エルビウム	69 Tm 168.9 テルミウム	70 Yb 173.0 イットリウム	71 Lu 175.0 ルテチウム
** アクチノイド	89 Ac (227)	90 Th 232.0 トリウム	91 Pa (231)	92 U 238.0 ウラン	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)

()内の数値は、既知同位体のうち最も安定なもの質量数である。