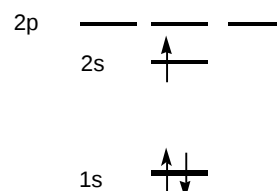


【1】2,3 行で説明せよ。必要ならば図や式を用いてよい。

- (a) 同位体と原子量の関係
- (b) ドブロイ波 (物質波)
- (c) d 軌道の数と概形
- (d) 軌道に電子を埋めていくときの規則 : (i) 構成原理 (ii) パウリの排他律 (iii) フント則
- (e) MO 法の LCAO 近似

【2】(a) 炭素原子 C ($Z = 6$) の基底状態の電子の占有の様子を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。



(例) リチウムの電子配置

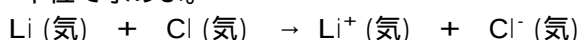
(b) ヘリウム原子の基底状態の電子配置を、 $\text{He} : 1s^2$ のように表記する。Cl ($Z = 17$) と Zn ($Z = 30$) の各原子の基底電子配置を、この表記法にならって答えよ。

(c) メタン CH_4 の四つの C-H 結合は等価である。これは、問 (a) の図で 2s 軌道と 2p 軌道が非等価という事実からは説明できない。炭素の原子軌道では何が起こったと考えられるか。

(d) 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。その理由も簡潔に記せ。

(e) 周期表では、周期を下へ降りて行くにしたがって、原子の第一イオン化エネルギーはどのように変化するか。その理由も簡潔に記せ。

(f) Li の第一イオン化エネルギーは 5.40 eV で、Cl の電子親和力は 3.61 eV である。次の反応に必要なエネルギーを kJ mol^{-1} 単位で求めよ。



ただし、(気) は気体状態を示し、粒子間の相互作用はないものとする。電荷素量 $e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$ 、アボガドロ定数 $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 。

【3】酸素分子はピラジカルとして振る舞うことがわかっている。分子軌道の概略を描いて説明せよ。答案では下図のような軌道準位図を完成させて用いること。分子軌道には例えば σ_{1s} などの符号を付すこと。なお、酸素は 8 番原子である。

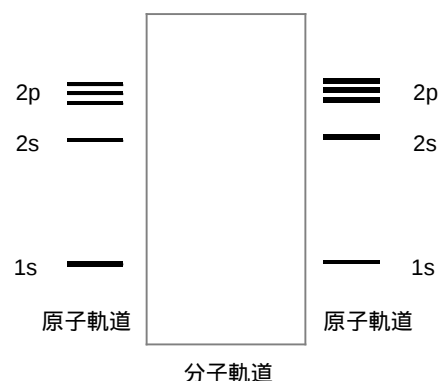
(a) どの原子軌道の組み合わせが、 σ 結合と π 結合を形成するのか、

(b) どの分子軌道が縮重しているのか、

(c) 不対電子の存在する分子軌道はどれか、

(d) 結合次数はいくらか、

についてそれぞれ 1 行程度で説明を加えること。



【4】多原子分子における双極子モーメントは、分子を構成する原子間での結合で双極子モーメントを考慮して、さらに分子の幾何学的形状で決めることができる。 CO_2 が完全に無極性であるのに対して、 NO_2 と O_3 はそれぞれ 0.32 D と 0.53 D の双極子モーメントを有する。

(a) NO_2 と O_3 の分子の形状についてどのように考えられるか。

(b) その構造をとることの原因を述べよ。ただし NO_2 はオクテットを満たさない原子を含むことになるが、形式的に $\text{O}=\text{N}-\text{O}\cdot$ 、つまり一つの酸素原子が価電子 7 個を持つとして考えよ。