

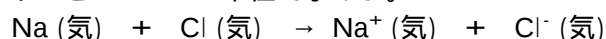
【1】2,3 行で説明せよ。必要ならば図や式を用いてよい。

- (a) ボーアモデルに導入された量子仮説
- (b) パウリの排他原理
- (c) d 軌道の数と概形
- (d) 原子・分子軌道の規格化
- (e) 化学結合における共有結合性 / イオン結合性の割合を見積る方法
- (f) LCAO 近似

【2】原子番号と元素記号の対応は、Z=1 (H) から 36 (Kr) まで順に以下の通りである。

H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr.

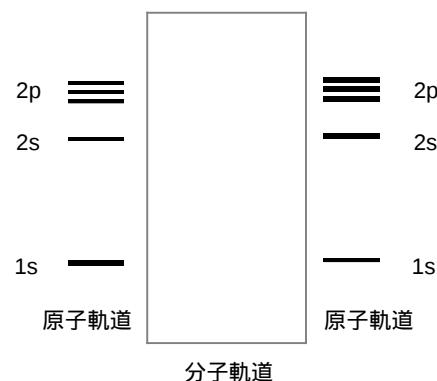
- (a) H から Kr の周期表を描け。族、周期の番号も付すこと。
- (b) He 原子の基底状態の電子配置を、He : $1s^2$ のように表記する。C, Cl^- , Mn^{2+} の各原子 / イオンの基底電子配置を、この表記法にならって答えよ。
- (c) 設問 (b) の各原子 / イオンについて、不対電子の数を答えよ。
- (d) 水素原子では、 $n = 2$ の s と p の原子軌道のエネルギーは縮重しているが、それより大きな原子ではその縮重は解ける。理由を述べよ。
- (e) Na 原子と Mg 原子の第一イオン化エネルギーはどちらが大きいのか、説明せよ。
- (f) Cl 原子と Br 原子の電子親和力はどちらが大きいのか、説明せよ。
- (g) この表の原子のうち、電気陰性度の最も大きな原子はどれか。
- (h) Na の第一イオン化エネルギーは 5.14 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) は気体状態を示す。e = 1.60×10^{-19} C, $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 。

【3】 O_2 は磁性をもつが (正確には磁石に吸い寄せられる性質がある) が、 N_2 や F_2 には磁性がない (磁石に吸い寄せられない)。 O_2 の性質を理論的に明らかにできたことは分子軌道法の顕著な成果の一つである。分子軌道の概略を描いて、この性質を説明せよ。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。

- (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、
- (e) O_2 はなぜ磁性をもつか、 N_2 はなぜ持たないか、についてそれぞれ 1 行程度で説明を加えること。



【4】

- (a) BF_3 と NF_3 の分子構造を予想せよ。
- (b) ホルムアルデヒド分子 H_2CO の構造を、炭素と酸素の両方の原子に適当な混成軌道を考えることによって、軌道の重なりとともに示せ。エチレンと等電子的であることはヒントになるだろう。
- (c) アレン $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$ という化合物がある。立体的には右図のような構造をとる。中央の炭素原子は直線状 2 配位であるが (注: 原子価は 4) この原子にはどのような混成軌道を考えるのが妥当か。
- (d) アレンがこのような分子構造をとることの理由を、軌道の重なりを図示しながら説明せよ。

