

学生番号 () 氏名 ()

[1] 次の文を読んで、(1)~(3)に答えなさい。

分子の電子構造の主な量子力学理論は二つある。原子価結合法は、共有電子対の概念を出発点とする。この理論では、化学において広く使われている σ 結合と π 結合の概念や、昇位、混成などの概念が導入される。分子軌道法は、原子オービタルの概念を分子オービタルの概念にまで拡張する。分子オービタルとは、分子中の全ての原子にわたって広がっている波動関数である。

(1) 原子価結合法と分子軌道法の違いを、例をあげて説明せよ。

(2) sp^3 混成オービタルについて、例をあげて説明せよ。

(3) LCAO-MO とは何か説明せよ。

[2] 次の文を読んで、(1)~(3)に答えなさい。

原子の電子構造，すなわち原子核のまわりの電子の配置を説明するために，量子力学をどのように使うかを学ぶ際に出会う概念は，原子，分子の構造や反応を理解するために非常に重要である。したがって，広い範囲にわたって化学に応用される2つの型の原子を区別することが必要である。水素型原子は [①] で，この例としてはH, He⁺, Li²⁺などがある。多電子原子は [②] で，水素以外のすべての中性原子がこれに含まれる。

(1)文中の [①] ~ [②] にあてはまる文章を記せ。

① []

② []

(2)図3は，原子番号Zの水素型原子の最初のいくつかの動径波動関数Rである。ここで，rは原子核からの距離（半径），a₀はボーア半径である。(a)，(b)，(c)はそれぞれ何というオービタルの動径波動関数であるか次の例にならって記号を記せ。[例] 3d

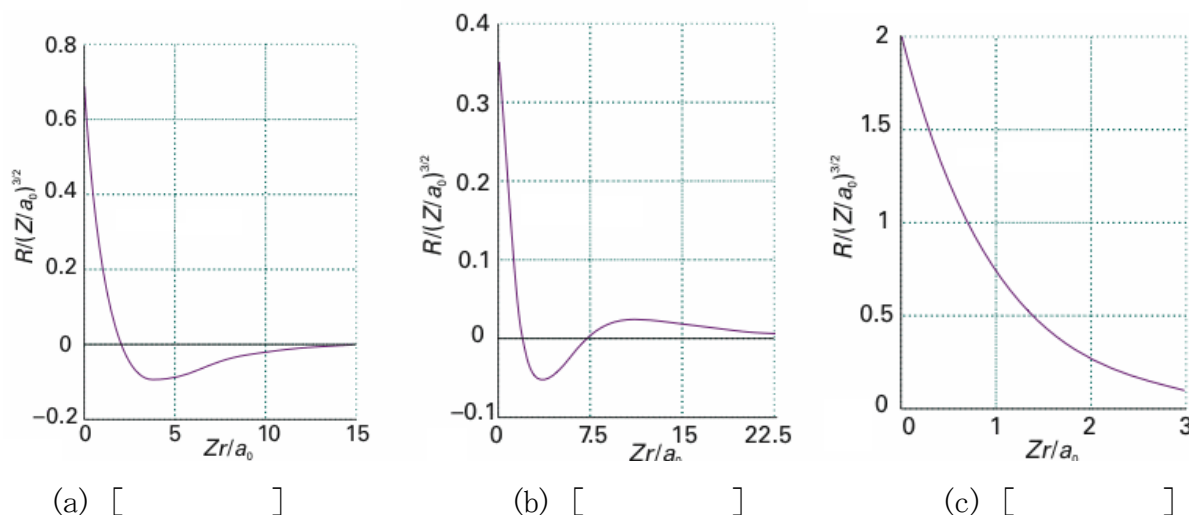


図3. 原子番号Zの水素型原子の最初のいくつかの動径波動関数R

(3)図3の(a)と(b)に見られる動径波動関数の値がゼロになる点を何というか答えよ。

[3] 次の文を読み、以下の(1)~(3)に答えなさい。

VSEPR 則 (valence shell electron-pair repulsion; 原子価殻電子対反発則) は次のような規則にしたがって分子の構造を推定する方法である。

(1) 分子 (イオン) は電子対間の反発ができるだけ少なくなるような構造をとる。

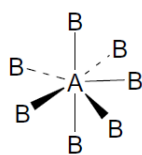
(2) 電子対間の反発は $lp-lp > lp-bp > bp-bp$ の順に強い。

(3) 電子対間の反発はその角度が 90° より十分大きいときには無視できる。

ここで、lp (lone pair) は非共有電子対を、bp (bonding pair) は共有結合電子対を表している。

(1) VSEPR 則に基づいて、次の分子の立体的な構造を図示して、例と同じように分子の形の名称を記せ。化学結合を表す線のうち、実線は紙面上にあること、「くさび形」は紙面より手前に向かっていて、点線は、紙面より奥に向かっていてを表している。立体構造を図示するときも、実線、くさび形、点線を使って示せ。

[例] AB_7



五方両錐

(1) AB_2

(2) AB_3

(3) AB_4

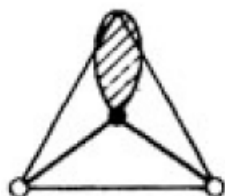
(4) AB_5

(5) AB_6

(2) VSEPR 則に基づいて次の化合物の構造を推定して図示せよ。ただし、非共有電子対がある場合には、

[例] NO_2^- のように斜線で示してはっきりと分かるように図示せよ。

[例] NO_2^-



(1) CH_4

(2) BF_3

(3) NH_3

(4) NH_4^+

(5) H_2O

[4] 以下の(1)~(3)に答えよ。

(1) 金属の構造には、立方最密充填 (ccp)、六方最密充填 (hcp)、体心立方 (bcc) などがある。立方最密充填 (ccp) 構造および六方最密充填 (hcp) 構造について説明せよ。

(2) せん垂鉛鉱型結晶構造とウルツ鉱型結晶構造について説明せよ。

(3) 単座配位子と2座配位子の例を、それぞれ2つ以上挙げて、分子式を記せ。