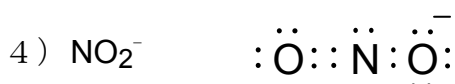
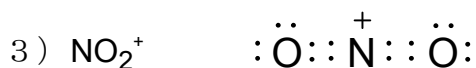
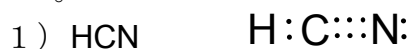
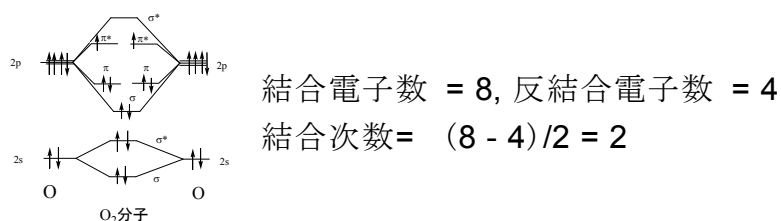
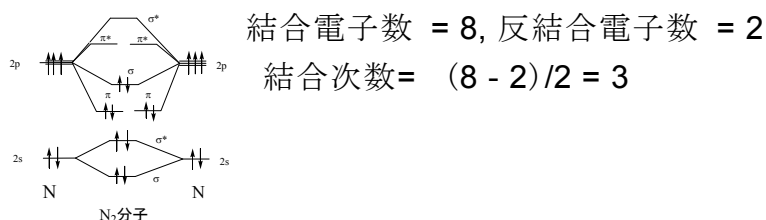


1. 次の分子・イオンについて、ルイス構造式を描け。形式電荷等は省略しないこと。



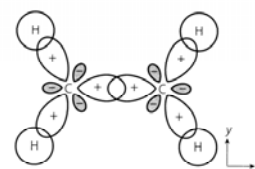
2. 次の水素分子を例にならって窒素分子( $\text{N}_2$ )と酸素分子( $\text{O}_2$ )の分子軌道の基底状態の電子配置と結合次数をそれぞれ示せ。また、酸素分子が磁性をもつ理由を簡潔に説明せよ。



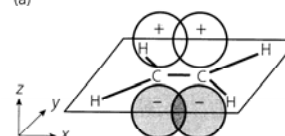
酸素分子は  $\pi^*$  に不対電子を 2 個持っているため、磁性をもつ。(対となっている電子は磁性を持たない)

3. エチレン( $\text{C}_2\text{H}_4$ )分子の構造を、各原子の混成軌道、および  $\pi$  軌道を基に立体的に示せ。

炭素原子は  $sp^2$  混成軌道で、結合角約 120 度で平面構造をとる。(右図)

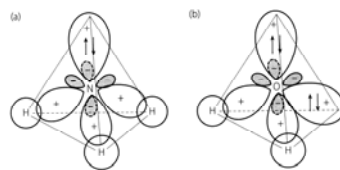


残った  $2p_z$  軌道同士で  $\pi$  軌道を形成する。(右図)



4. アンモニア(NH<sub>3</sub>)、及び水(H<sub>2</sub>O)分子の非共有(孤立)電子対の方向性について、混成軌道の考え方から説明せよ。

アンモニアは孤立電子対を1つ、水は2つもち、どちらも全部で4組の電子対がある。従って正四面体のsp<sup>3</sup>混成軌道となり、孤立電子対の向きは右図のようになる。



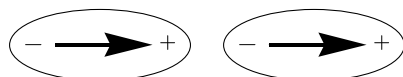
5. 水と二酸化炭素分子を例にとり、双極子モーメントの方向を図示せよ。

電気陰性度の差から、各結合の、双極子モーメントは右の小さな矢印となる。分子全体としては、そのベクトルの和で、太い矢印となる。CO<sub>2</sub>は双極子モーメントは0である。



6. 次の「分子間に働く力」について、どのような物理的力に基づくかを、例を示して述べよ。

- 1) 双極子モーメントをもつ分子同士



上図では+と-の静電引力(クーロン力)が斥力を上回るので分子間に引力が働く。アセトトリル分子同士など。

- 2) 双極子モーメントを持たない(非極性)分子同士

いわゆる「分散力」で、原子の核(+)と電子(-)は瞬間的には双極子として振る舞うので、他の分子に双極子を誘起する。この2つの双極子は、上記同様、引力として働き、時間的な平均をとっても引力となる。窒素分子やメタン分子同士など。

- 3) 水素結合

電気陰性度の大きな原子(OやF)に結合している水素原子は、正電荷を帯びている。この水素原子と、他の原子の非結合電子対との間で、弱い結合を生じる。これを水素結合という。

7. 1) 二重結合をもつ分子は近紫外・可視領域の光を吸収するものが多い。この理由を簡潔に述べよ。

二重結合はσ結合とπ結合から形成される。この結合性π軌道の電子を反結合性π軌道(π\*)に励起する(π→π\*)のに必要なエネルギー(ΔE)がちょうど、近紫外・可視領域の光のエネルギーに相当する。従って、二重結合が複数あると、多くの場合、近紫外・可視領域の光を吸収する。単結合しかない場合、σ→σ\*の励起エネルギーは大きく、それは遠紫外線になるので近紫外・可視領域の光は吸収することができない。

2) ほとんどの多原子分子は、赤外領域の電磁波を吸収する。この理由を簡潔に述べよ。

同様に赤外領域の電磁波は、分子の振動（2原子間の結合の伸縮など）のエネルギーに相当する（基本振動から倍音への励起）。多原子分子は、必ず結合の振動エネルギー準位を持っているので、赤外線を吸収する。

8. 次の語句を簡潔に説明せよ。

1) 不対電子

原子軌道には電子が2個まで入る。原子軌道に電子が2個入るとき、これが電子対をなす。原子軌道に1個しか電子が入っていない場合、この電子は対をつくらぬ。これを不対電子という。分子軌道の場合も同様に、軌道に1個しか電子が入っていない場合、これを不対電子という。不対電子をもつ原子・分子は磁性をもつ。

2) 結合性軌道と反結合性軌道

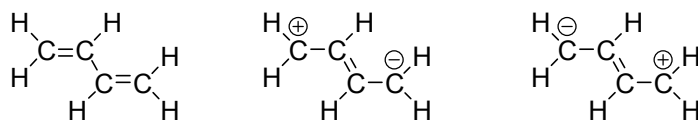
分子軌道法では、一般的に、分子を構成する原子の原子軌道をもとにして結合の分子軌道を構築する。元の原子軌道に比べエネルギーの低くなった分子軌道を結合性分子軌道、高くなった分子軌道を反結合性分子軌道という。

3) 永久双極子モーメント

分子を構成している原子の電気陰性度に差がある場合、分子内の電荷分布に偏りが生じる。その結果、分子に双極子モーメントが生じる場合がある。この双極子モーメントは、分子の立体構造や電荷の偏り方に依存した、その分子固有の量であり、永久双極子モーメントという。（これに対し、双極子モーメントを持たない分子も、外部電場や、他の双極子との相互作用で双極子モーメントを生じる。この一時的な双極子モーメントは誘起双極子モーメントといわれる。）

4) 電子の非局在化

例えばブタジエンの構造式は、下記のように、各原子の位置を移動させず、全電子数を変えずに、結合を書き換えることができる。



これらを「共鳴構造」式という。

中央の図は、左の構造式の左上の2重結合の $\pi$ 電子が右下に移動した状態。右の図はその逆である。このように $\pi$ 電子が元の2重結合に止まらず分子内を自由に移動できる事を「 $\pi$ 電子の非局在化」という。