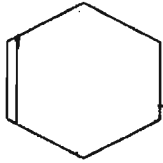
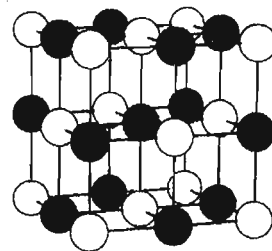


- 1)  $\text{CH}_4$ 、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  の立体構造を図示し、 $\angle\text{H-C-H}$ 、 $\angle\text{H-N-H}$ 、 $\angle\text{H-O-H}$  の大きさの順番およびそのようになる理由を VSEPR モデルを用いて説明せよ。
- 2) シクロヘキセン (図を参照) の水素化エネルギーの実験値  $118.6\text{kJ/mol}$  とベンゼンの水素化エネルギーの実験値  $205.3\text{kJ/mol}$  からベンゼンの  $\pi$  電子の非局在化エネルギーを算出せよ。式や答えのみでなく非局在化エネルギーとは何かおよび算出方法の説明も記すこと。



シクロヘキセン

- 3) アリルアニオン ( $\text{CH}_2=\text{CH}\cdot\text{CH}_2$ ) の分子軌道を、 $\pi$  電子のみを対象とし ( $\pi$  電子近似)、分子軌道関数  $\Psi$  は原子軌道関数  $\chi_1, \chi_2, \chi_3$  の一次結合  $c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + c_3\chi_3$  で表現 (LCAO 法)、さらにヒュッケル近似を使用して求めたい。ここでクーロン積分を  $\alpha$ 、共鳴積分を  $\beta$  とすると
  - 1) 得られる 3 種類の分子軌道およびその軌道エネルギーを  $\chi_1, \chi_2, \chi_3$  および  $\alpha$ 、 $\beta$  をもちいて記述せよ。分子軌道はエネルギーの小さい順から  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3$  と表現せよ。
  - 2) アリルアニオンでは  $\pi$  電子は 4 つある。一番安定な電子配置状態をエネルギー準位図を用いて表現せよ。電子のスピンも考慮すること。
  - 3) アリルアニオンの全  $\pi$  電子エネルギーおよび非局在化エネルギーを  $\alpha$ 、 $\beta$  を用いて表現せよ。2 個の  $\pi$  電子が入ったエチレン分子の全  $\pi$  電子エネルギーは  $2(\alpha + \beta)$ 、電子が 2 個入って孤立した p 軌道の全  $\pi$  電子エネルギーは  $2\alpha$  であることは使用してよろしい。
- 4)
  - 1) 酸・塩基の定義を 3 通り紹介せよ。
  - 2)  $\text{Co}^{3+}$  イオンに  $\text{F}^-$  を 6 つ配位結合させて正八面体型の  $[\text{CoF}_6]^{3-}$  イオンを作製した場合、 $\text{F}^-$  イオンは酸として働いたか、塩基として働いたか。理由を沿えて答えよ。
  - 3) 錯体の分光化学系列とは何かを説明せよ。また分光化学系列によると  $\text{NH}_3 > \text{F}^-$  であるが、これを用いて  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  は非磁性であるが  $[\text{CoF}_6]^{3-}$  イオンは常磁性である理由をエネルギー準位図を用いながら説明せよ。  
(ヒント：Co 金属の電子配置は  $[\text{Ar}]3d^74s^2$  である。)
- 5)
  - 1) 体心格子の本当の定義を述べよ。また図に示す岩塩構造は体心格子か否かを理由もつけて記述せよ。
  - 2) 立方晶の本当の定義を述べよ。また底心立方格子は原理的にあり得ない理由を述べよ。
- 6)
  - 1) 溶液の場合の物質の光透過率、吸収係数とは何か。入射光の強度を  $I_0$ 、透過光の強度を  $I$ 、光路長を  $l$ 、溶液の濃度を  $c$  として記述せよ。
  - 2) 平滑に磨いた金属はある波長より長い光は反射するが、その波長より短い光は反射しない。また殆どの金属は微粒子にすると黒色となる。これらの理由を「バンド構造」、「価電子帯」、「伝導帯」、「禁制帯」なるキーワードを用いて説明せよ。
  - 3) 半導体および絶縁体はある波長より長い光は透過するが、それより短い光は吸収する。この理由を「バンド構造」、「価電子帯」、「伝導帯」、「バンドギャップ」なるキーワードを用いて説明せよ。



岩塩構造