2006年2月6日

化学第二 期末試験	担当　真島 豊

1．新しく軌道ができるときのルールについて次の空欄に適当な言葉を埋めよ。

・２つの原子軌道が相互作用すると新しい２つの［A.　　］ができる
・２つの新しい軌道は、［B.　　］と［C.　　］である
・［B.］のエネルギーは元の軌道のエネルギーよりも真空準位から［D.　　］
・［C.］のエネルギーは元の軌道のエネルギーよりも真空準位から［E.　　］
・［F.　　］が大きい程、新しくできた軌道のエネルギーは大きく分裂する
・自然界に安定して存在する分子または分子イオンでは、［G.　　］の和は、［H.　　］の和よりも大きい

2．二酸化炭素分子について次の問いに答えよ。

2-1　二酸化炭素の分子軌道のエネルギー準位と電子占有状態について説明せよ。

2-2　二酸化炭素分子の双極子モーメントについて説明せよ。なお、分子の双極子モーメントは、分子中の各結合の双極子モーメントのベクトル和となり、炭素と酸素の電気陰性度はそれぞれ２．６と３．５である。

3．四つある炭素原子のsp^3混成軌道のうち二つの波動関数が、

$\Psi(sp^3)_1 = c_1\Psi(2s) + c_2\{\Psi(2p_x) + \Psi(2p_y) + \Psi(2p_z)\}$ **および、**

$\Psi(sp^3)_2 = c_1\Psi(2s) + c_2\{-\Psi(2p_x) + \Psi(2p_y) - \Psi(2p_z)\}$ **とあらわされるとき次の問に答えよ。**

ただし、$\Psi(2s), \Psi(2p_x), \Psi(2p_y), \Psi(2p_z)$ はそれぞれ、2s軌道、$2p_x$軌道、$2p_y$軌道、$2p_z$軌道の規格化済みの波動関数とする。

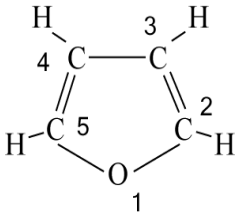
3-1　波動関数の係数c_1とc_2の値を求めよ（導出過程も記すこと）。

3-2　残り二つの波動関数$\Psi(sp^3)_3$と$\Psi(sp^3)_4$を求めよ（導出過程を説明すること）。

4．トランス型ポリアセチレンの性質について次の問いに答えよ。

トランス型ポリアセチレンにおいては、炭素原子及び水素原子がどのような立体配置を示すか、炭素原子ー炭素原子間距離および各結合同士の結合角を含めて説明せよ。
　次の値を適宜参照すること。エタンのC-C結合距離は1.54Å、エチレンC=Cの結合距離は1.34Å、アセチレンC≡Cの結合距離は1.21Å。

5．テトラヒドロフランTHF（右図参照）に水素イオンH^+が結合するプロトン化反応について次の問に答えよ。



5-1　最高被占軌道（HOMO）と最低空軌道（LUMO）の定義について説明せよ。

5-2　テトラヒドロフランにおける結合にあずかる軌道を全て記せ。

5-3　プロトン化反応が酸素原子O1で起こると仮定すると、どのように起こることが予想されるかを説明せよ。

5-4　プロトン化反応が、炭素原子C2原子あるいは炭素原子C5原子とH^+イオンの間で起こる理由を説明せよ。