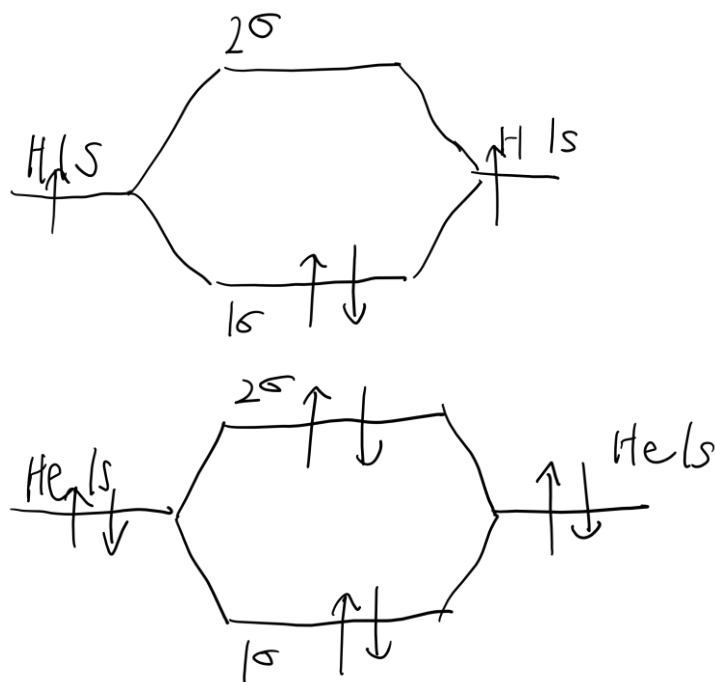


問 1

結合軌道は、2つの原子価区間で電子の確率密度が高く、原子が安定化され分子を形成する。反結合軌道は、核間で電子の確率密度が低くなり、原子間の引力を打ち消すため、原子単体の方が安定である。

問 2



H 原子は分子を形成するときに原子状態よりも低いエネルギーを持つ分子を作ることができるため、分子を形成するが、He 原子は分子を形成するときに、原子状態よりも高いエネルギーを持つ分子を作るため、分子を形成しない。

問 3

H₂⁺について

結合軌道に 1 個の電子が入る (反結合軌道には電子なし)

$$\text{結合次数} : \frac{1}{2}(1 - 0) = 0.5$$

結合の可能性 : 結合は形成できるが、結合はそれほど強くない

H₂について

結合軌道に 2 個の電子が入る (反結合軌道には電子なし)

$$\text{結合次数} : \frac{1}{2}(2 - 0) = 1$$

結合の可能性 : 安定した結合を形成する。

He₂について

結合軌道に 2 個，反結合軌道に 1 個の電子が入る。

$$\text{結合次数} : \frac{1}{2}(2 - 1) = 0.5$$

結合の可能性：結合は形成できるが，結合は弱い・

He₂について

結合軌道に 2 個，反結合軌道に 2 個の電子が入る。

$$\text{結合次数} : \frac{1}{2}(2 - 2) = 0$$

結合の可能性：結合は形成できない

結合の強さは結合次数の値を比べて H₂が最も強い結合を持ち、次いで H₂⁺と He₂⁺が弱い結合を持ちますが、He₂は結合を形成できないということが分かる。

問 4

NH₃ 分子では，中心の窒素原子は 3 つの共有電子対と 1 つの孤立電子対を持つ。VSEPR 則に基づく，4 つの電子対が正四面体に近い配置を取るが，孤立電子対は共有電子対よりも強い反発力を持つため，結合角は CH₄の結合角である 109.28° よりも小さくなり，実際には 106.47° になる。

問 5

(1)

HF 分子は二原子分子であり、直線状に配置されるが、フッ素原子の電気陰性度が非常に高いため、結合電子対がフッ素原子側に強く引き寄せられる。この電子の偏りにより、フッ素側に部分的な負の電荷 (δ⁻)、水素側に部分的な正の電荷 (δ⁺) が生じる。電荷が偏っている場合、分子全体に電気双極子モーメントが存在し、対称性が失われることになる。つまり、HF 分子には分子全体で電荷の均等な分布が存在しないため、極性分子として分類される。

(2)

H の 1s 軌道のエネルギーは -13.6 eV であり、F の 2p 軌道のエネルギーは -17.4 eV である。このように分子軌道のエネルギー差が大きく、結合軌道がエネルギーの低いフッ素側に偏るため、HF 分子は電気双極子モーメントを持ち、極性分子となります。

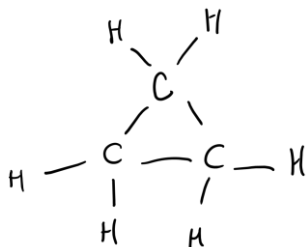
(3)

HF 分子は、電気陰性度の差が大きく (Δχ = 1.78)、フッ素が電子を強く引き寄せるため、共有結合と部分的なイオン性を持ちます。結合エネルギーが高いことから、イオン性が結合に加わっていることが示され、結果として HF は極性分子となります。

問 6

(1)

シクロプロパンの構造式は以下の通りである



(2)

シクロプロパンの対称操作は以下の通り

C3 回転軸

σ_v 鏡面

恒等操作

点群：D3h

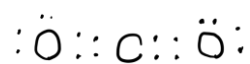
ステレオ投影図



問 7

CO₂分子のルイス構造は、炭素原子と 2 つの酸素原子間に二重結合を形成することで表される。

ルイス構造は以下のようになる。



問 8

(a) ピリジン

対称要素：C6 軸(回転軸)， σ (平面反射)

極性：窒素原子が持つ孤立電子対により、分子全体に電気的非対称性があり、極性を示す。

(b) ニトロエタン

対称要素：C₂ 軸(回転軸), σ (平面反射)

極性：N-O 結合の極性により、分子全体が非対称になり、極性を示す。

(c) 気相の臭化水銀

対称要素：C₂ 軸(回転軸), i(反転中心)

極性：分子の対称性により、全体として電気的非対称性が消失し、極性を示さない。

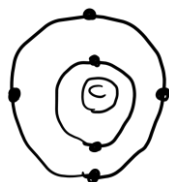
問 9

(1)

炭素

最外殻電子数：4 個

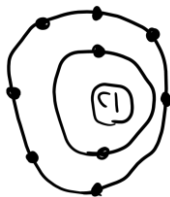
電子配置：



塩素

最外殻電子数：7 個

電子配置：



水素

最外殻電子数：1 個

電子配置：

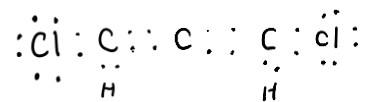


(2)

総電子数：28

総共有結合数：8

(3)



(4)

立体的なルイス式では、C=C 結合により平面構造が形成され、Cl 原子が結合しているため、すべての原子が同一平面上にある。

この分子がシストランス異性体を持たない理由は端の4原子が90度ねじれるためである。

(5)

対称操作：回転操作 (C_2 軸)， 反射操作 (σ)， 反転操作 (i)