

第2回化学A演習 2014/07/11 ※学籍番号・クラス・名前を明記すること

必要なら次の定数を用いて以下の問いに答えなさい。

プランク定数 $h = 6.626 \times 10^{-34}$ Js, 電子の電荷 $e = 1.602 \times 10^{-19}$ C

光速 $c = 2.998 \times 10^8$ ms⁻¹, 電子の質量 $m_e = 9.109 \times 10^{-31}$ kg, 1 eV = 96.49 kJ/mol

1. 等核2原子分子：以下の設問に答えなさい。

(1) N₂分子の電子配置を軌道エネルギー順に以下のC₂分子の例にならって書きなさい。

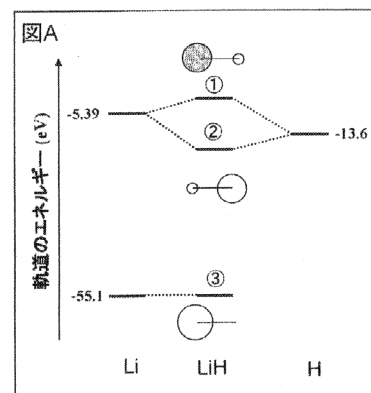
例：C₂ $(1s\sigma_g)^2 (1s\sigma_u^*)^2 (2s\sigma_g)^2 (2s\sigma_u^*)^2 (2p_x\pi_u)^2 (2p_y\pi_u)^2$

(2) N₂分子とN₂⁺イオンのそれぞれの結合次数を答えなさい。

(3) B₂分子と同様な磁気的性質を示す第二周期の元素からなる等核2原子分子とその電子配置を(1)の例にならって書きなさい。

2. 異核2原子分子：次の文章を読み、(ア)には番号を、(イ)～(エ)には適切な語句を、(オ)、(カ)には適切な数値をそれぞれ答えなさい。

異核2原子分子のLiHの分子軌道相関図を図Aに示す(丸印の大きさは、原子軌道の寄与の大きさを示す)。LiHのHOMOは(ア)である。このHOMOは、水素原子の(イ)軌道にリチウム原子の(ウ)軌道がわずかに混合してできている。この図から(エ)原子への偏りが大きくLi-H間の結合がかなりイオン結合性を有していると予想される。LiHの結合距離は0.16 nmで双極子モーメントが5.88 Dなので、LiHのイオン結合性は(オ)%と見積もられる。また、LiH、H₂の結合エネルギーがそれぞれ247、431 kJ/molであることが知られており、ここでLi、Hの電気陰性度がそれぞれ1.0、2.1とすると、Li₂の結合エネルギーは、(カ) kJ/molと、負の値に見積もられてしまう。



【ヒント】 $\pm e$ の単位電荷が0.10 nm離れているとき、双極子モーメント $\mu = 4.80$ Dである。

2原子分子ABの結合エネルギーとA₂とB₂の結合エネルギーの平均との差 Δ_{AB} は、電気陰性度 χ_A 、 χ_B を用いて、次のように表される。

$$\sqrt{\frac{\Delta_{AB}}{96.49}} = |\chi_A - \chi_B|$$

3. ポリエンの光吸収：次の文章を読み、(キ)、(サ)には数値を、(ク)～(コ)には適切な語句をそれぞれ答えなさい。

$(-\text{CH}=\text{CH}-)_n$ のような非局在 π 電子を持つ鎖状分子はポリエンと呼ばれ、一つの二重結合ごとに(キ)個の π 電子が存在し、これらはポリエン内を自由に運動している。この結果、ポリエン中の単結合部分の炭素原子間距離は、エタン分子よりも(ク)。また、二重結合部分の炭素原子間距離は、エチレン分子よりも(ケ)。ポリエンとして、図Bの化合物を例にとると、この化合物中に含まれる炭素原子のとり混成軌道のうち、(コ)混成だけが存在しない。このポリエン内を自由に運動する π 電子を1次元の箱の中の粒子として考え、箱の長さを0.76 nmとすると、HOMOからLUMOへ電子を光励起するときの吸収波長は(サ) nmとなる。

