

物性化学 定期試験問題 2026年度 担当教員 片山正士

クラス：2年 理一-18, 25, 26, 理二三-19 試験実施日：6月3日(水) 3限
 試験時間：90分 解答冊子：A4版両面3枚綴り1冊 計算用紙：1枚
 持込可能物品：関数電卓のみ

全問を解答せよ。問題をどの順に解答用紙に解答してもよいが、問題番号は明示せよ。説明を求められている問題の解答には図を用いてもよい。

問1 分子の構造について原子価殻電子対反発(VSEPR)則に基づいて答えよ。

- (1) メタン(CH₄)、アンモニア(NH₃)、水(H₂O)、アセトン((CH₃)₂CO)のルイス構造を図示せよ。
- (2) メタン、アンモニア、水の結合角∠H-C-H、∠H-N-H、∠H-O-Hの大小関係を述べ、その理由を説明せよ。
- (3) アセトンがどのような立体構造をとるか図示せよ。

問2 硝酸(HNO₃)の考えうる3種の共鳴構造を図示せよ。形式電荷が生じる場合には明記すること。また、どの構造が主極限構造となるかを示せ。

問3 水酸化物イオン(OH⁻)の分子軌道について考える。以下の間に答えよ。

- (1) O 2p_z軌道と対称性が合致する原子軌道を全て記せ。ただし、OH結合方向をz軸とする。
- (2) O原子とH原子の原子軌道のエネルギーは表1のようになる。水酸化物イオンの分子軌道の軌道相関図を図示せよ。
- (3) 水酸化物イオンの各分子軌道を構成する原子軌道の位相の関係を示せ。係数の大小は無視して構わない。水素分子の場合にはエネルギーの低い順に、H 1s + H 1s、H 1s - H 1s、となる。
- (4) OH⁻と比べて、OHの結合距離はどのようにになると考えられるか、理由とともに述べよ。

表1

| 原子軌道 | H 1s | O 1s | O 2s | O 2p |
|-----------|-------|------|-------|-------|
| エネルギー(eV) | -13.6 | -562 | -33.9 | -17.2 |

問4 図1に示すリコペン(波長548nmに吸収極大をもつ天然色素で、トマトなどに含まれる。このような長い直鎖共役ポリエンを含む分子が可視光領域に吸収をもつ理由を、π電子、LUMO、HOMOなどの用語を用いて説明せよ。

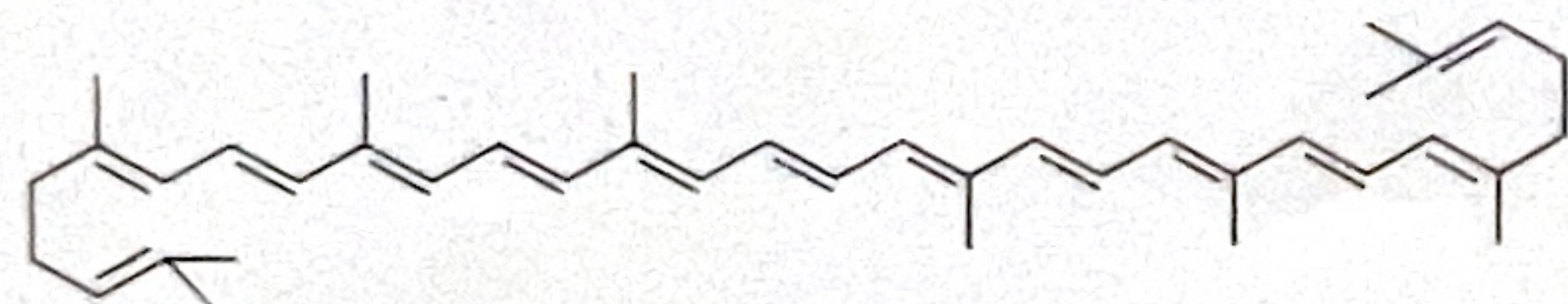


図1

問5 ヒュッケル法に基づいて導かれるπ電子の分子軌道について考える。分子軌道のエネルギーをε、クーロン積分をα、共鳴積分をβとして以下の間に答えよ。

- (1) ベンゼン(C₆H₆)に関する永年行列式を示せ。
- (2) ベンゼンの6つのπ分子軌道のエネルギーを、それぞれα、βを用いて示せ。
- (3) ベンゼンの全π電子エネルギー、およびπ電子の非局在化エネルギーをそれぞれ求めよ。

問6 金属錯体について以下の間に答えよ。

- (1) 単座配位子、多座配位子、両座配位子とはどのようなものであるか、それぞれ例を挙げて説明せよ。
- (2) 六配位正八面体型の金属錯体において、中心金属のd軌道はそれぞれどのようなエネルギー準位をとるか、孤立した5重縮退のd軌道を基準として図示せよ。
- (3) 第一遷移系列の2価金属イオン(Ca²⁺~Zn²⁺)の水和エネルギーは、原子番号が大きくなるにつれてW字型の傾向をとる。この理由を説明せよ。

問7 結晶について以下の間に答えよ。

- (1) コランダム型構造は、陰イオンがとる六方最密充填構造の八面体孔の一部を陽イオンが占有しているとみなすことができる。酸化水素イオン(O²⁻)のイオン半径を0.124 nmとした際、陽イオンに求められるイオン半径の条件を求めよ。
- (2) ボルン・ハーバーサイクルを用いてNaClの格子エネルギーを求めよ。ただし、
 Naの昇華熱 S_{Na} = 108 kJ/mol、
 Naのイオン化ポテンシャル IP_{Na} = 502 kJ/mol、
 Cl₂の解離エネルギー (Cl原子あたり) $\frac{1}{2}D_{Cl_2}$ = 121 kJ/mol、
 Cl原子の電子親和力 EA_{Cl} = -354 kJ/mol、
 NaClの生成熱 ΔH_f = -411 kJ/mol
 とする。

問8 以下の間に答えよ。

- (1) 金属、半導体、絶縁体のバンド構造を図示し、それらの違いならびに電気伝導性について説明せよ。
- (2) タンパク質の高次構造とはどのようなものであるかを説明せよ。
- (3) 分子間に生じるファンデルワールス力とはどのような相互作用か説明せよ。