

科目名 物性科学	教官名 畑中研一	7月28日 2時限 試験時間 90分
指定クラス 理 I 20, 21	解答用紙 両面 1枚	持ち込み 不可

以下の各問に答えよ。但し、解答以外の文章を解答用紙に記入した場合は減点対象とする。

1. 次の分子のうち、オクテット則を満たさない分子を全て選択せよ。

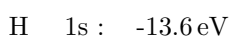
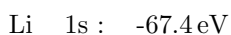


2. 水素化リチウム (LiH) を考える時、

リチウム原子と水素原子における電子配置は、



また、原子軌道のエネルギー (計算値) は以下の通りである。



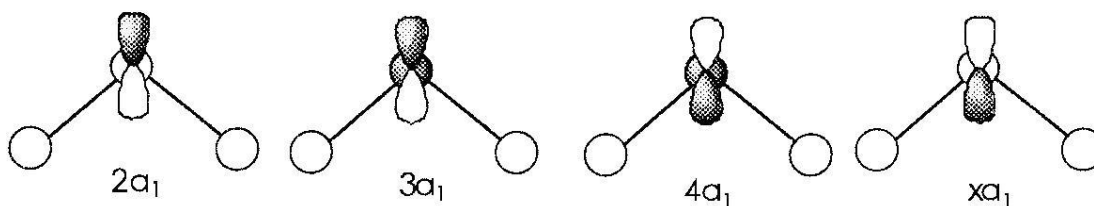
水素化リチウム分子では、どちらの原子が負に帯電していると考えられるか？

理由も述べよ。

3. B₂ 分子の電子配置は (1σ_g)²(1σ_u)²(2σ_g)²(2σ_u)²(3σ_g)² と期待され、反磁性と予想される。ところが、実際の B₂ 分子は常磁性体である。想定される実際の電子配置を記し、常磁性となる根拠を示せ。

4. 水分子の分子軌道を考える際、下図のような 2a₁, 3a₁, 4a₂ のような軌道が考えられるが、下図における xa₁ のような軌道を考える必要があるかないかについて考察せよ。

(ヒント: 水素分子の 2s 軌道と 2p 軌道のエネルギーの安定性について考える)



5. ブタジエンかベンゼンを例に挙げて、全 π 電子エネルギー（または非局在化エネルギー）と π 結合次数との関係を論ぜよ。但し、数式で示してもよいし、言葉で説明してもよいこととする。
6. Diels-Alder 反応とはどのような反応なのかを、フロンティア軌道理論で説明せよ。
7. $[\text{CoF}_6]^{-3}$ 錯体の電子配置において、相対的にエネルギーの低い（安定な） d_{xy} , d_{yz} , d_{zx} 軌道に電子の入る余地があるのに、よりエネルギーの高い（不安定な） σd^* （反結合性軌道）に電子が入ることを説明せよ。（ヒント：電子対形成エネルギーと配位子場分裂のエネルギーとの関係）
8. 価電子帯と伝導体の間には電子の準位が存在しない領域（禁制帯、そのエネルギー幅がバンドギャップ）が存在し、バンドギャップの大きさによって、金属（バンドギャップがほとんどない）、絶縁体（バンドギャップが大きい）、半導体（バンドギャップが小さくて、熱エネルギーなどによって価電子帯の電子が伝導帯へと励起される）に分けられる。それでは、絶縁体に不純物を加えて半導体にする場合には、どのようにして電子が物質中を移動するのか、バンドギャップに注目して説明せよ（ n 型半導体と p 型半導体それぞれについて説明せよ）
9. 電荷移動錯体は、電子供与体（D）のHOMO軌道にある電子が、それよりも少しだけエネルギーの高い電子受容体（A）のLUMO軌道に移動することによって生成する。即ち、電子がエネルギーのより高い軌道に移動している。何故このようなことが起こるのかを説明せよ。（ヒント：実際の電荷移動錯体は、電子が移動していない状態と電子が移動した状態の間にある。）
10. シクロヘキサンの各炭素に置換基Xを1個ずつ導入した化合物 $(\text{CHX})_6$ の立体異性体の数は全部で幾つか？但し、シクロヘキサン環のコンホメーション変化に由来する axial, equatorial 等の違い（配座異性）は数えないものとする。