

問題4 一般化学 (100点)

以下の問い(問1, 問2)に答えよ。

問1 水素化リチウム(LiH)は、室温ではNaCl型の結晶をつくり、空気が乾燥していれば安定である。図1は、LiHが安定であることを分子軌道法に基づいて考察するために、リチウム(Li)と水素(H)の原子軌道、および水素化リチウム(LiH)の分子軌道のエネルギー準位(単位eV)を示したものである。

この図を参考にして、以下の設問(1)~(7)に答えよ。

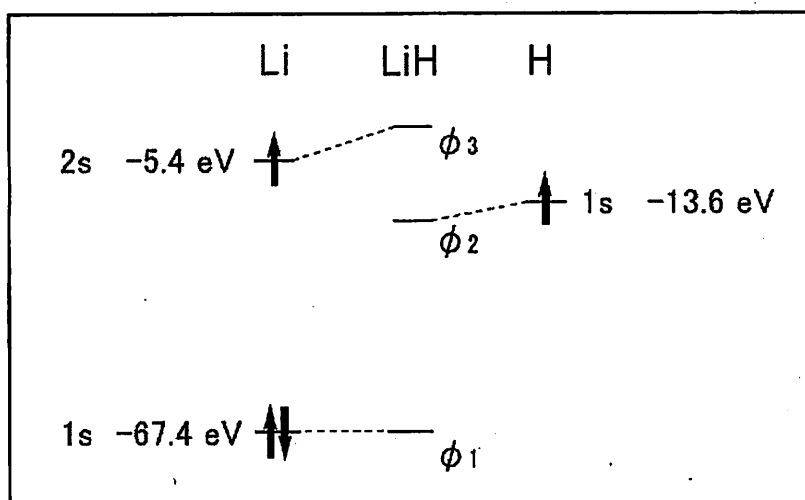


図1 LiHの分子軌道のエネルギー準位(友田, 2007を改)

- (1) 図1によれば、Li原子の1s軌道のエネルギー準位は -67.4 eV 、H原子の1s軌道のエネルギー準位は -13.6 eV と、両者の値は大きく異なっている。その理由を50字以内で述べよ。
- (2) LiHにおいて形成される分子軌道について以下のように考察できる。Li原子の1s軌道はH原子の1s軌道とほとんど相互作用せず、そのまま分子軌道 ϕ_1 になる。また、Li原子2s軌道はH原子の1s軌道と相互作用して、結合性軌道 ϕ_2 と反結合性軌道 ϕ_3 を形成する。図2は、これらの分子軌道を図示したものである(左がLi原子、右がH原子)。
- (a), (b), (c)のいずれかが ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 に相当するかを記せ。

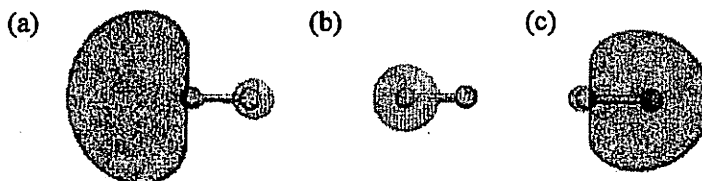


図2 LiHの分子軌道(友田, 2007を改)

- (3) 基底状態のLiHにおいて、電子は ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 にどのように配置されるかを記せ。
- (4) 設問(3)の電子配置に基づいてLiHが安定であることを説明せよ。

(次ページに続く)