

請考生依指示
填寫准考證末兩碼

--	--

國立臺灣大學
106 學年度高中科學班資格測驗試題本
化學

—作答注意事項—

考試時間：共 120 分鐘（請自行斟酌分配時間）

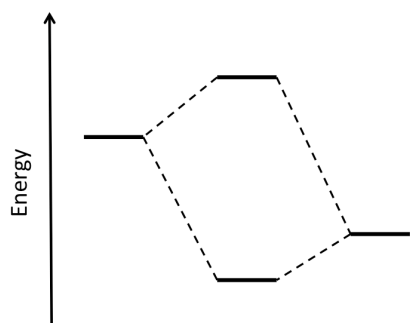
作答方式：務必作答於「各科答案卷上」，請以黑色或藍色原子筆、鋼珠筆或中性筆作答，
並標明題號。

祝考試順利！

請聽到鈴(鐘)聲響後，於題本右上角方格
內填寫准考證末兩碼，再翻頁作答。

第一題：(共 30 分)

分子軌域理論(molecular orbital theory)是現代化學解釋化學共價鍵的量子力學理論，最簡單的分子軌域理論原理，可以用氫原子與氦原子之間分別用它們的 $1s$ 軌域產生鍵結來闡述。以下便是氫原子與氦原子形成氫氦分子 (HHe) 的分子軌域能階圖，請注意此圖為定性的描述而且圖中的標示並不完整：

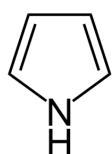


試回答下列問題：

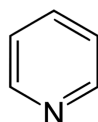
- (1) 此一軌域能階圖的左右兩邊表示原子軌域，中間是分子軌域。請於答案紙上畫下此一圖形，在左右兩邊能階清楚的標示氫原子與氦原子的位置，並標示所形成的鍵結 (bonding) 與反鍵結 (anti-bonding) 軌域。請問此一鍵結形成的是一個 σ 鍵或者是 π 鍵？請用 σ/σ^* 或 π/π^* 符號標示分子軌域的能階並解釋你的答案。(8%)
- (2) 用圓圈畫出兩個分子軌域的形狀，請注意你應該清楚標示軌域正負號特性並且用圓圈大小定性的表示兩原子 $1s$ 所佔的比例。解釋為何兩個軌域分別被稱為鍵結與反鍵結軌域。(8%)
- (3) 請給出氫氦分子(HHe)的電子組態。這個分子有沒有極性？它的哪一端會傾向與帶負電的陰離子結合？請解釋如何用分子軌域理論解釋此一分子的極性。(6%)
- (4) 分別計算氫氦陽離子(HHe^+)、氫氦分子(HHe)、氫氦陰離子(HHe^-)等三個分子之鍵級，並且預測這三個雙原子分子中之氫氦鍵鍵長的順序。(8%)

第二題：(共 35 分)

芳香性在化學上是一個非常重要的概念，可以用來解釋許多化合物的結構以及化學分子的反應性。在教科書中，我們通常用苯環以及由其衍生的碳環分子來解釋芳香性的概念，不過，許多含有氮原子的雜環化合物，也可以具有芳香性，而且它們在自然界中扮演著非常重要的角色。在這些含氮的芳香性化合物裡，最簡單也最具有代表性的，是吡咯與吡啶這兩個分子：



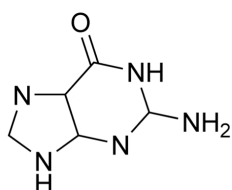
吡咯



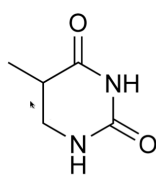
吡啶

試回答以下題目：

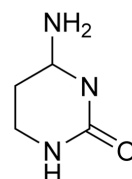
- (1) 請解釋何謂芳香性。具有芳香性的分子除了都具有 π -共軛系統以外，還具有哪些分子結構上或電子數目上的特性？它們具有哪些化學特性？請列舉之。(6%)
- (2) 請以吡啶當作例子解釋要如何判定它是不是屬於芳香性的分子。(4%)
- (3) 若從路易士結構來看，吡咯與吡啶這兩個分子的氮原子上都帶有孤對電子，因此他們應該都具有鹼性。但是在實驗中發現，吡咯的共軛酸的 pK_a 約為 0.4，而吡啶的共軛酸的 pK_a 約為 5.3。試從芳香性的角度解釋此一酸鹼的趨勢。(5%)
- (4) 下圖所示的甲、乙、丙等三個含氮雜環化合物是自然界中 DNA 鹼基對的重要組成，圖中畫出了這三個分子的骨架，請為這三個骨架在適當位置加上雙鍵，在答案紙上正確描繪出三個分子的結構式。此外，請在結構式上清楚標示出這三個分子所有鹼性的氮原子之位置。(10%)



甲



乙



丙

- (5) 在 DNA 的鹼基對中，甲會與乙、丙兩者其中之一形成配對，請問與甲配對的分子是哪一個？請畫出分子結構來描述此一鹼基對在 DNA 中形成配對結合的形式，特別注意要明確畫出配對結合的位置以及連結 DNA 骨架之位置。請問穩定此一鹼基對主要的分子間作用力為何？請在你畫的鹼基對結構中明確標出此一作用力。(10%)

請翻頁繼續作答

第三題：(共 35 分)

熱力學第二定律可以用來解釋反應的方向性與自發性，在考慮化學反應時，我們常用自由能來描述熱力學第二定律。考慮吉布斯自由能(G)的定義為

$$G = U - TS + PV$$

其中，U 是系統的內能、T 是絕對溫度、S 是熵、P 是壓力、V 是系統體積。在定溫定壓力的情況下，符合熱力學第二定律的反應有足夠的吉布斯自由能來驅使反應自然的發生，因此稱為自發反應，反之，若違背熱力學第二定律則為非自發反應。然而，在自然界中，許多非自發的反應可以藉由與其它自發反應偶合而得到足夠能量，進而可以進行反應。特別是在生物體系裡面，三磷酸腺苷(ATP)的水解常被用來驅動其他反應的發生：



此一反應放出自由能，也因此 ATP 在生物體內作為儲存能量的高能量分子，並被稱為生物系統的「能量貨幣」。在這個題目裡面，我們來考慮一下 ATP 驅動葡萄糖 (glucose) 與果糖 (fructose) 形成蔗糖 (sucrose) 的反應：



- (1) 請描述ATP與ADP的不同，並說明ATP水解反應可以釋放出相當可觀能量的原因。(5%)
- (2) 請用熵的概念簡單敘述熱力學第二定律。若考慮吉布斯自由能變化量(ΔG)，試分別敘述一個系統中的反應分別為自發、平衡、非自發時， ΔG 應該符合什麼樣的條件。(5%)
- (3) 熱力學給出吉布斯自由能變化量與反應商 (Q) 之間的關係為
$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$$
請給出合成蔗糖反應中，從葡萄糖濃度([glucose])、果糖濃度([fructose])以及蔗糖濃度 ([sucrose]) 計算 Q 的公式。在標準壓力與溫度下，倘若小明將等體積的1M果糖與1M葡萄糖水溶液混合，試計算此時形成蔗糖的吉布斯自由能變化量，並判斷此一狀況下此一反應是否為自發反應？解釋你的答案。(8%)
- (4) 上述的果糖與葡萄糖混合水溶液，在假設反應完全的情況下，試估計溶液中最後的蔗糖濃度 (氣體常數 $R = 8.3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$)。請問僅僅由葡萄糖與果糖反應生成蔗糖是否可行？若在生物體內有適當酵素存在的情況下，此反應是否可行？解釋你的答案。(7%)

- (5) 請寫下用一個 ATP 分子水解驅動蔗糖合成的總反應式，此一反應的標準反應吉布斯自由能(ΔG°)為何？若將等體積的1M ATP、1M 果糖與1M葡萄糖水溶液混合，完全反應後，溶液中最後的蔗糖濃度為何？此反應平衡的方向是否趨向蔗糖的生成？解釋你的答案。(5%)
- (6) 實際上在實驗室中，將ATP、果糖與葡萄糖水溶液混合後，並無法觀察到蔗糖的生成，試解釋原因。在生物體內，此一反應需要適當酶的存在才能進行，請說明酶扮演的角色並用一幅簡單的反應位能面圖(從反應物變到產物整個過程的系統自由能變化圖)解釋加入酶的影響。加入酶會不會影響子題(5)中計算的結果？(5%)

試題結束