

- 【1】水素類似原子について、 $n=1,2,3$ の原子軌道を**全て**描け。ローブの方向と添字を対応させよ。
指定教科書は、d 軌道について記載が少ないので、各自調べる必要があるだろう。
- 【2】H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg の第一イオン化エネルギー、 IE^1 、第二イオン化エネルギー IE^2 および電子親和力 (EA) を調べ、原子番号を横軸に、エネルギーを縦軸にしたプロットを描いてみよ。 IE^1, IE^2, EA を同一のグラフに重ね書きする。単位系を合わせる必要がある。ピーク位置の規則性を考えよ。
これは EA が、 IE^0 の逆過程に相当することを学習するための演習である。EA は (必要に応じて) -1 倍するなど、判りやすいプロットを試みよう。 IE^2 等は「化学便覧基礎編」のようなデータ集にある。Web 検索でも見いだされるであろう。
3. 基底状態で次の原子はそれぞれ何個の**不対電子**をもっているか。
Mn, Sc, Fe, Zn
- 【4】 次の事項を説明せよ。
a) 結合性分子軌道・反結合性分子軌道 b) 結合次数
c) σ 結合・ π 結合 d) 共鳴
e) 結合解離エネルギー f) 双極子モーメント
5. Li の第一イオン化エネルギーは 5.4 eV で、Cl の電子親和力は 3.61 eV である。次の反応に必要なエネルギーを kJ mol^{-1} 単位で求めよ。
$$\text{Li(g)} + \text{Cl(g)} \longrightarrow \text{Li}^+(\text{g}) + \text{Cl}^-(\text{g})$$

ただし、(g) は気体状態を示し、粒子間の相互作用はないものとする。
(172 kJ mol⁻¹)
- 6) 水素原子においては $3s, 3p, 3d$ 軌道のエネルギーはすべて同じであるのに、多電子原子においてはこれらの軌道のエネルギーが異なるのはなぜか。
- 7) 次の元素をイオン化エネルギーが増加する順にならべ、その理由を述べよ。
F, Na, Cs, Ne
- 8) ナトリウムとマグネシウムについて第二イオン化エネルギーをくらべたとき、どちらが大きいか。その理由を述べよ。
- 9) Mn^{2+} あるいは Fe^{3+} から $3d$ 電子を取り去るのに必要なエネルギーはどちらが大きいか。その理由も述べよ。
- 【10】 一般に AB 二原子分子の結合エネルギーは AA および BB 等核二原子分子の結合エネルギーの相加平均より大きくなる。次の分子のうちでこのずれが大きいのはどれか。それはなぜか。
NO, CO, HF, HBr, IBr, ICl
- 【11】 CsCl の核間距離は 2.90 \AA であり、その双極子モーメントは 10.5 D である。この分子のイオン性を求めよ。
- 【12】 $\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}$ の結合角は、それぞれ $109.5, 107.3, 104.5^\circ$ である。この傾向を C, N, O 原子の sp^3 混成軌道を用いて説明せよ。