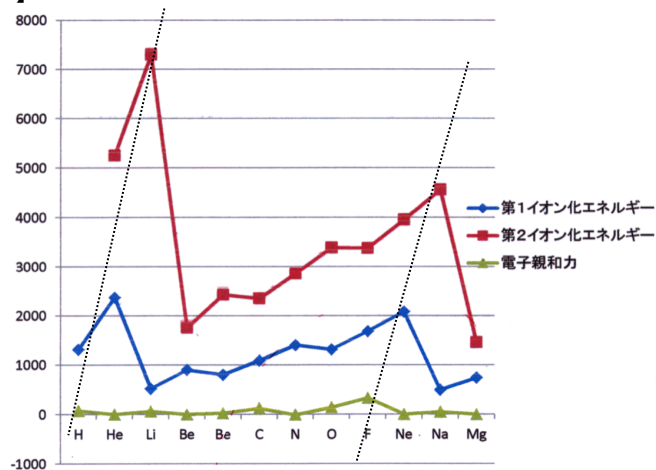


【1】全部書け、とのことですから、2s, 3s, 3p などをお忘れなく。

位相について色分けしてください（山＝白、谷＝黒とか）。さらに、(n-1)枚の節面、角度部分には1枚の節面の存在にも留意頂きたい。2s, 3s にはそれぞれ、同心球面状に1、2つの節面がある。3p には一つの亜鈴型の内側に節面があつて（マトリョーシカ人形のような）、角度成分の持つ1枚の節面と併せて2つの節面となる。2p は角度成分からくる1枚の節面だけがあるので、亜鈴の内側に動径方向の節はない。2s の節構造と比べて、ちょっとした落とし穴です。



【2】



ピークを持つ原子に言及する。-EA は17族で、 IE^1 は18族で、 IE^2 は1族で最小をとる。すなわち、図中の黒破線の関連に気付くと、Slater による説明の部分で、電子親和力が第ゼロ次イオン化の逆反応であるとしたことが了解できる

【3】 Mn: 5個 Sc: 1個 Fe: 4個 Zn: 0個

【4】

- (a) 結合性分子軌道は同位相の軌道の相互作用によって生じ、分子同士を結合させる。
反結合性分子軌道は逆位相の軌道の相互作用によって生じ、分子同士の結合を断裂させる。
- (b) 原子同士の結合の数、等核二原子分子では B.O. (結合次数) $= \frac{1}{2}(n_b - n_a)$ で表される。
(n_b : 結合軌道にある電子数, n_a : 反結合軌道にある電子数)
- (c) σ 結合は結合軸方向を向いた原子軌道同士の重なりによって生じる結合。
 π 結合は結合軸に垂直な上下の方向に伸びた軌道 (π 軌道) 同士の重なりによって生じる結合。
- (d) 教科書 p.84
- (e) 分子あるいはイオン中の化学結合を絶対零度において切断するのに必要な最低エネルギー。
- (f) 教科書 p.86

【5】 $(5.46 \text{ eV} - 3.61 \text{ eV}) \times 96.48 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ eV}^{-1} = 172 \text{ kJ mol}^{-1}$

【6】 水素原子は電子が一つであるため、電子同士の相互作用がない。
多電子原子では電子間のクーロン反発、遮蔽効果等相互作用が生じる。
s, p, d 軌道が分裂するため。

【7】 イオン化エネルギー $I_p = R_{\infty} h c \cdot \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2}$ より。
同一周期は左からアルカリ金属で最小、希ガスで最大となる。
また、同族の場合、原子番号が大きい方が小さいとなる。
したがって $\text{Cs} < \text{Na} < \text{F} < \text{Ne}$

【8】第2イオン化エネルギーは Na^+ , Mg^+ より電子を取り去るのに必要なエネルギー。
 Na^+ は最外殻が閉殻であるため、 Mg^+ よりも大きなエネルギーが必要となる。

【9】 Mn^{2+} と Fe^{3+} はどちらも3d軌道に5つの電子を持つ。そのため、3d電子を取り去るのに必要なエネルギーが大きいのは核からの引力が大きい Fe^{3+} となる。

【10】炭素の電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p_x)(2p_y)$ となり、 $2p_z$ が空軌道であるため、電子は空の $2p_z$ 軌道に入る。一方窒素の電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p_x)(2p_y)(2p_z)$ となり、空の軌道がないため $2p$ 軌道に電子対を形成して入らなければならない。そのため、窒素の場合、電子同士の反発が大きくなるため、電子は受けとりにくい、つまり電子親和力は小さくなる。

【11】100%のイオン結合をしたときの値は

$$\begin{aligned} \mu_{100} &= 8.2 \\ &= (1.602 \times 10^{-19} \text{ C}) \times (2.90 \times 10^{-10} \text{ m}) \\ &= 4.65 \times 10^{-29} \text{ C m} \end{aligned}$$

実験値は 10.5 D であるから

$$\begin{aligned} \mu_{\text{exp}} &= 10.5 \text{ D} \times 3.336 \times 10^{-30} \text{ C m D}^{-1} \\ &= 3.50 \times 10^{-29} \text{ C m} \end{aligned}$$

したがって、この分子のイオン性は

$$\frac{3.50 \times 10^{-29} \text{ C m}}{4.65 \times 10^{-29} \text{ C m}} = 75.3 \%$$

【12】

3つの分子はメタンと等電子であり、メタンの sp^3 混成を利用して説明することができる。アンモニアも水もそれぞれ N と O 原子は sp^3 混成である。アンモニアと水における結合角がそれぞれ 109.5° から小さくなるのは、非共有電子対の反発が結合性電子対の反発に比べて大きい為であり、結合性電子対の成す角は、理想的な四面体角よりも狭められてしまうと考えられる。

Valence-Shell Electron-Pair Repulsion Theory (VSEPR) ←VB 法に基づき、混成軌道を与える根拠とされる。

ルール1：電子対同士は最も離れて配置される。このとき非共有電子対も含める。

ルール2：非共有電子対同士の反発 > 非共有電子対と結合電子対の反発 > 結合電子対同士の反発
(結合電子対は核2つに挟まれて空間的に縮こまっているため、反発力が弱い)

【MO 法まとめ】追加クイズ

Q1: 水素分子は、なぜできるのか?

Q2: He_2 は、なぜできないのか?

Q3: H_2^+ や H_2^- は存在するか?

A1: 原子2個でいるときより、分子1個でいるときの方がエネルギーが (2β だけ) 安定だから。

参考: $\alpha = -13.6 \text{ eV}$ ($= -R_\infty$, リュードベリ定数), $\beta = -2.3 \text{ eV}$ ($= D_{\text{H-H}}$ 結合解離エネルギー)

A2: 分子になってもエネルギー得がないから。より正確にいうと、分子の方がややエネルギー損。

参考: α , β は水素のときとは異なる。実験的にも求めにくい。だから文字式で扱う。

A3: H_2^+ は分子のときが β だけ安定、 H_2^- も分子のときが β だけ安定、どちらも存在する。

または、結合次数 B.O. (H_2^+) = 0.5 (> 0)、B.O. (H_2^-) = 0.5 (> 0) で、どちらも存在する。

量子化学的定義によれば、Bond Order = $(1/2)(\text{結合電子数} - \text{反結合電子数})$; 小数も可。

B.O. (H_2) = 1、B.O. (He_2) = 0. 結合次数がゼロのときは分子にならない。