

- [1] 一例を示しますが、いろいろな別解も可能です。
- 分子を形成するのに安定化する (結合を形成する) 軌道・不安定化する (結合を開裂させる) 軌道
 - 量子化学的に定められる、(結合性電子数-反結合性電子数) / 2
 - σ : 2つの原子を結ぶ軸に対して回転対称性を持つ軌道
 π : 2つの原子を含む面に対して鏡面反対称性を持つ軌道
 - 一つの構造式で表現することができない分子構造を複数の構造式の寄与の和とみなす考え方
 - 一つの結合を均一開裂させる (個々の原子にそれぞれ不対電子を持たせる) のに必要なエネルギー
 - 結合電子に生じた電荷の偏りを電荷掛ける方向ベクトルの量 ($qr = \mu$) で表したものの
- [2] (1) $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2$
 (2) $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2pz}^2 \pi_{2px}^2 \pi_{2py}^2 \pi_{2px}^{*2} \pi_{2py}^{*2}$
- [3] (1) 結合次数は順に、2、2.5、1.5。
 (2) 結合が弱いと原子間距離は長くなる。 $r(O_2^-) > r(O_2) > r(O_2^+)$ 。
- [4] (1) 窒素原子は sp^3 混成であり、正四面体型を欲する。ただし、非共有電子対からの反発を受けて、H-N-H角は、109.5度よりやや小さい。
 (2) ベリリウムは sp 混成である。この混成は $2p_x$ を使うとしたら x 成分だけを有するので、結合角は180度になる。
- [5] $-NH-CO-$ のNHはプロトンドナー、Oはプロトンアクセプターである。これが本来一次元ポリマーであるポリアミドに対して分子間の架橋構造を与えて、一次元でなく二～三次元のポリマーとして振る舞うようになり、丈夫になる。
- [6] ポーリングの定義によると、このずれが結合のイオン性であり、2原子間の電気陰性度の差として定義された。だからその電気陰性度表を見て、2原子の差の大きいものが最もイオン性割合が高いと判断される。HFが大きい。
- [7] 完全イオン結合のときに予想される双極子は $\mu = qr = 4.64 \times 10^{-29} \text{ C m} = 13.9 \text{ D}$ 。
 イオン性は、実際の分子の双極子の上記に対する割合として求められる。 $10.5 \text{ D} / 13.9 \text{ D} = 0.755$
- [8] (a) NO : $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2px}^2 \pi_{2py}^2 \sigma_{2pz}^2 \pi_{2px}^{*1}$
 NO^+ : $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2px}^2 \pi_{2py}^2 \sigma_{2pz}^2$
 (b) NO の結合次数 2.5 ; NO^+ の結合次数 3 ゆえ NO^+ の結合の方が強い。
- [9] 金属における自由電子は、電場から受けるクーロン力によって加速度を得て動き出す。これが原子核に衝突して停止する。熱は原子核の振動幅を大きくするので、温度上昇に伴い衝突が増える、即ち伝導度が低下する。
 半導体は、熱活性型に伝導帯に電子を励起して、伝導帯における電子および価電子帯のホールの双方がキャリアーとなって伝導度を得る。伝導度はキャリアーの密度に比例する。従って、高温で伝導度が上昇する。
 (要点：金属の説明は「自由電子モデル」、半導体の説明は「バンド理論」に基づいています)