

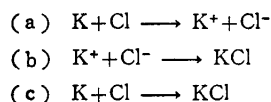
化学構造論

F1 石田

宿題その3

(7月20日)

1. カリウムのイオン化エネルギーは 4.34 eV 、塩素の電子親和力は 3.61 eV である。また気体分子 KCl の核間距離は 0.267 nm である。次のそれぞれの反応エネルギーを求めよ。ただし、原子、イオン、分子はすべて気体状態とする。



(解)

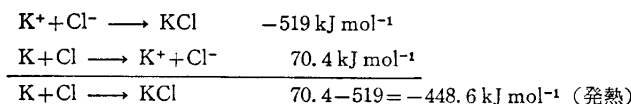
(a) 1つの電子を K から Cl に移すために必要なエネルギーは、
 (イオン化エネルギー) - (電子親和力) = $4.34 - 3.61 = 0.73 \text{ eV}$ 。これを kJ mol^{-1} に換算すると
 $0.73 \times 96.5 = 70.4 \text{ kJ mol}^{-1}$ (吸熱)

(b) K^+ と Cl^- が無限大の距離から 0.267 nm まで接近したときに放出するエネルギーはクーロンエネルギーである。真空の誘電率 = $8.85 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1}$ 、陽イオンと陰イオンの荷電数を n^+ 、 n^- とすると、

$$\begin{aligned} \text{クーロンエネルギー (J mol}^{-1}\text{)} &= -\frac{N_A(n^+e)(n^-e)}{4\pi\epsilon_0 r} \\ &= -\frac{(6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1})(1.60 \times 10^{-19} \text{ C})(1.60 \times 10^{-19} \text{ C})}{4 \times 3.14 \times (8.85 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1})(2.67 \times 10^{-10} \text{ m})} = -5.19 \times 10^5 \text{ J mol}^{-1} = -519 \text{ kJ mol}^{-1} \end{aligned}$$

(発熱)

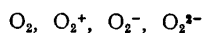
(c), (a) と (b) の結果から



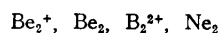
2. フッ化リチウム分子 LiF(g) はイオン結合で、核間距離は 0.156 nm である。 $\text{Li}^+(\text{g})$ と $\text{F}^-(\text{g})$ からこの分子ができるときの生成エネルギーを求めよ。 (-888 kJ mol^{-1})

3. LiF(g) の解離エネルギー ($\text{LiF} \rightarrow \text{Li} + \text{F}$) は 701 kJ mol^{-1} 、リチウムのイオン化エネルギーは 520 kJ mol^{-1} である。フッ素の電子親和力を計算せよ。(前問の結果を利用せよ) (333 kJ mol^{-1})

5. 次の分子の結合の強さを比較せよ。



6. 次の分子は安定に存在するかどうか。またその安定度を結合次数から論ぜよ。



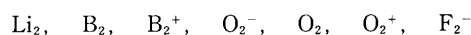
8. 1,3-ブタジエン $\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2$ の炭素が sp^2 混成軌道を形成しているものとして、その分子構造 (σ 結合と π 結合) を図示せよ。(ヒント. 4つの炭素の未混成の p_z 軌道は側面で重なり π 軌道を形成する)

9. ナフタレンの共鳴混成体を描け。また sp^2 混成軌道を用いて分子構造 (σ 結合と π 結合) を図示せよ。(ベンゼンの構造を参考にせよ)

- 1) 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

- 2) 次の分子の分子軌道における電子配置を示し、その結合次数を用いて安定性を論じよ。



- 9) 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。



- 10) 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。