

および Mg

- (1) Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na の第1イオン化エネルギー I_1 と第2イオン化エネルギー I_2 を調べ、原子番号を横軸に、エネルギー (単位 kJ mol^{-1}) を縦軸にした折れ線グラフを描き、 I_1 と I_2 の原子番号依存性を比較せよ。

さらに、電子親和力 (EA) もプロットしてみよ。 I_1 , I_2 , EA を同一のグラフに重ね書きするとわかりやすいだろう。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。

第二イオン化エネルギーは、「化学便覧基礎編」のようなデータ集にある。以下からもダウンロードできる。
http://www5f.biglobe.ne.jp/~rokky/kaisetu/0/syuukihyou_pdf03.pdf

- (2) KCl の核間距離は 3.14 \AA である。Slater の規則 (教科書 p.43) を用いて、それぞれのイオンの半径を求めよ。
- (3) 2・1 Slater の規則を用いて、次の原子のしゃへい定数、有効核電荷、第一イオン化エネルギーを計算せよ。
 (1) ${}_{19}\text{K}$, (2) ${}_{23}\text{V}$, (3) ${}_{5}\text{B}$, (4) ${}_{55}\text{Cs}$
- (4)* 異種核からなる二原子分子には極性が認められる。HF 気体の双極子モーメントは $6.08 \times 10^{-30} \text{ Cm}$ であり、原子間距離は 92.6 pm であった。この結合におけるイオン性を求めよ。なお、電気素量は $1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ である。
- (5) 次表の結合エネルギー D を用いて、H 原子と Cl 原子の電気陰性度を求めよ。ただし、F の電気陰性度は 4.0 とする。

表 2・5

	H_2	F_2	Cl_2	HF	HCl
$D[\text{kJ mol}^{-1}]$	436	155	243	566	431

結合エネルギーのうち、共有結合部分を求める必要がある。このとき、相加平均を使って下さい。配布したプリント参照のこと。(相乗平均を用いる流儀もあるが、違いはわずかである)。

- (6) 次の各イオンの磁気モーメント (スピンのみ) をボーア磁子単位で算出せよ。
 (まず、 $1s^2 2s^2 \dots$ の様式に従って、電子配置を記してから)
 (i) ${}_{47}\text{Ag}^+$ (ii) ${}_{28}\text{Ni}^{2+}$ (iii) ${}_{26}\text{Fe}^{2+}$
- (7) O_2 の分子軌道の電子配置を、 $\sigma_{1s}^2 \dots$ の様式に従って記せ。次に O^2 がピラジカルであることを説明せよ。酸素は8番原子である。
- (8) Mo_2 は6重結合を持つとされている。関係する軌道を図示し、電子配置を示せ。
 参考: ${}_{42}\text{Mo}$ の基底電子配置は、 $[\text{Kr}] 4d^5 5s^1$
 (4d と 5s において、Hund 則が支配的になった結果である)
- (9)* VSEPR (価電子殻電子対反発) に基づいて、分子構造を予想せよ。
 BCl_3 , NCl_3 , SCl_2
- (10) (i) アレン ($\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$) の中央の炭素は結合角が 180° である。両端の水素の空間的配置がわかるように分子構造を描け。その際、中央の炭素の混成状態を明らかにして、 π 結合の発生する様子を図示すること。unique axis (この場合は分子長軸) を z 軸に選ぶ習慣がある。
 (ii) CO_2 やケテン ($\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{O}$) は、アレンと『等電子的 (isoelectronic)』である。酸素原子の混成状態を明らかにして、その非共有電子対の存在を、空間的配置がわかるように描け。
- (11) 次の事柄を、混成軌道の s 性パーセンテージという概念を用いて説明せよ。
 (i) 1,3-ブタジエンの中央の C-C 結合は、ブタンのそれより短い。(半径に言及)
 (ii) アセチレンはアセチリド (カルボアニオンの一種) を作りやすい。(電気陰性度に言及)

メモ: *) 「理工系のための化学基礎」(第五版)(3)p.87、(8)p.83-84、も参照されたい。