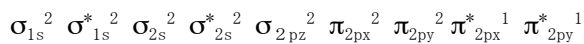
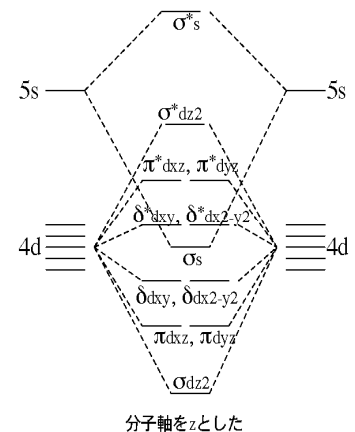


- (1) $Z_{\text{eff}}(\text{K}^+) = 7.75$, $Z_{\text{eff}}(\text{Cl}^-) = 5.75$ ゆえ、イオン間距離を反比例配分して、
 $r(\text{Cl}^-) = 1.80 \text{ \AA}$, $r(\text{K}^+) = 1.34 \text{ \AA}$
- (2) (1) $\sigma = 16.8$, $Z_{\text{eff}} = 2.2$, $IE = 4.8 \text{ eV}$.
 以下順に、(2) 19.7, 3.3, 10.8 eV. (3) 2.4, 2.6, 23.0 eV. (4) 52.8, 2.2, 3.7 eV.
- (3) 電気陰性度の Pauling の考えに沿って説明すればよい。化学結合は共有結合とイオン結合のそれぞれの寄与の和と考える。
- (4) イオン性 = 実測の双極子モーメント / 100%イオンのときの双極子モーメント計算値
 $\mu = qr$ ゆえ、 $\mu_{\text{calc}} = 1.48 \times 10^{-29} \text{ Cm}$; 実測との比をとると、0.41
 「理工系学生のための化学基礎 (第5版)」4.5 章、p.87 あたりも参考になる

- (5) $\Delta_{\text{HF}} = 270.5 \text{ kJ/mol}$
 $\chi_{\text{H}} = \chi_{\text{F}} - 0.102\sqrt{270.5} = 2.3_2$ 複号で差の方を選ぶのは、H が F より陽性であることから判断
 $\Delta_{\text{HCl}} = 91.5 \text{ kJ/mol}$
 $\chi_{\text{Cl}} = \chi_{\text{H}} + 0.102\sqrt{91.5} = 3.3_0$ 複号で和の方を選ぶのは、Cl が H より陰性であることから判断
- (6) どの教科書にも記載されている、分子軌道法の成果の一つとして重要

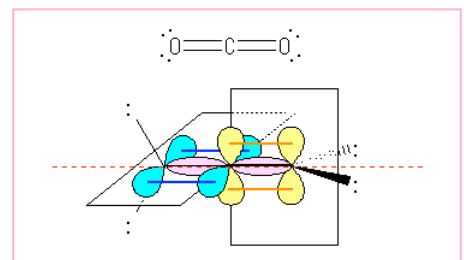


- (7) d 軌道の形成する分子軌道はプリントを参照下さい。
 一般には、同核金属 d-d 結合では、準位の下の方から、 σ 、 π (2重)、 δ (2重)、 δ^* (2重)、 π^* (2重)、 σ^* ができる。問(6)が理解できて、d 軌道のスケッチの描ける人は、発展課題として右図を書けなくてはなりません。各自で原子軌道を描いて復習しなさい。軌道間の重なるの大きさの順により、 σ が強い結合で、 π が中くらい、 δ が弱い結合。これに加えて、s 軌道から σ と σ^* もできる。
 4d と 5s からなる分子軌道の相対的上下関係は必ずしも予測できるわけではないが、6重結合であるということからすると、12個の電子が全て結合性軌道に配置されるようにエネルギー準位を予想して描く。つまり、 σ_{5s} を δ_{4d}^* より下に書くべきと判断する。



- (8) (1) 金属は T 上昇とともに ρ 上昇 (比例的に)、半導体は ρ 減少 (指数関数的に)。
 (2) 金属のバンドは価電子帯と伝導帯の間に gapless、半導体のバンドは gapped。
 (3) 金属は周期表で左・下側にある陽性元素、非金属は周期表で右・上側にある陰性元素。
 元素単体からなる真性半導体は、両者の境界に存在する。
- (9) 指示されたプロット (Arrhenius plot) を描くと傾きが E_a となる。 $E_g = 0.75 \text{ eV}$ 。

- (10) 中央の炭素はいずれも sp 混成。 π 結合は、左側と右側でそれぞれ別の p 軌道が使われるため、すわなち、 $\pi(2p_y)$ と $\pi(2p_z)$ を形成するため、互いに直交した π 結合となる。右図は CO_2 の π 軌道のスケッチ。C は sp , O は sp^2 。さらに、等電子 (isoelectronic) 分子は分子軌道の構造が類似。



- (11) sp^3 , sp^2 , sp 混成では s 性はそれぞれ、25, 33, 50% である。s 軌道は p 軌道に比べて核に近い。
 (i) sp^2 混成の炭素は sp^3 混成の炭素より、共有結合半径が小さい。
 (ii) sp 混成の炭素は、 sp^2 や sp^3 混成の炭素に比べて電気陰性が高い。