

【1】水素類似原子について、 $n = 1, 2, 3$  の原子軌道を**全て**描け。ローブの方向と添字を対応させること。指定教科書は、d 軌道について記載が少ないので、各自調べる必要があるだろう。

【2】H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg の第一イオン化エネルギー、 $IE^1$ 、第二イオン化エネルギー  $IE^2$  および電子親和力 ( $EA$ ) を調べ、原子番号を横軸に、エネルギーを縦軸にしたプロットを描いてみよ。 $IE^1$ 、 $IE^2$ 、 $EA$  を同一のグラフに重ね書きする。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。

これは  $EA$  が、 $IE^0$  の逆過程に相当することを学習するための演習である。 $EA$  は (必要に応じて)  $-1$  倍するなど、判りやすいプロットをしてみよう。 $IE^2$  等は「化学便覧基礎編」のようなデータ集にある。Web 検索でも見いだされるであろう。

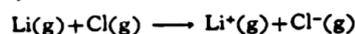
3. 基底状態で次の原子はそれぞれ何個の**不対電子**をもっているか。

Mn, Sc, Fe, Zn

【4】 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)  $\sigma$  結合・ $\pi$  結合                      d) 共鳴  
e) 結合解離エネルギー                  f) 双極子モーメント

5. Li の第一イオン化エネルギーは  $5.4 \text{ eV}$  で、Cl の電子親和力は  $3.61 \text{ eV}$  である。次の反応に必要なエネルギーを  $\text{kJ mol}^{-1}$  単位で求めよ。



ただし、(g) は気体状態を示し、粒子間の相互作用はないものとする。

( $172 \text{ kJ mol}^{-1}$ )

6) 水素原子においては  $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$  軌道のエネルギーはすべて同じであるのに、多電子原子においてはこれらの軌道のエネルギーが異なるのはなぜか。

7) 次の元素をイオン化エネルギーが増加する順にならべ、その理由を述べよ。

F, Na, Cs, Ne

8) ナトリウムとマグネシウムについて第二イオン化エネルギーをくらべたとき、どちらが大きいか。その理由を述べよ。

9)  $\text{Mn}^{2+}$  あるいは  $\text{Fe}^{3+}$  から  $3d$  電子を取り去るのに必要なエネルギーはどちらが大きいか。その理由も述べよ。

10) 炭素の電子親和力は  $122.5 \text{ kJ mol}^{-1}$  であるのに、周期表の隣の窒素になるとその値は  $-7 \text{ kJ mol}^{-1}$  である。この違いを両元素の電子配置を考慮して説明せよ。

11) 水素原子は電子を失って、ふつうは  $\text{H}^+$  イオンとして安定に存在するが、 $\text{H}^-$  イオンとして存在する場合もある。どのようなイオン性化合物として存在するときか、電気陰性度をもとにして考えてみよ。

【12】 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。

NO, CO, HF, HBr, IBr, ICl

【13】 CsCl の核間距離は  $2.90 \text{ \AA}$  であり、その双極子モーメントは  $10.5 \text{ D}$  である。この分子のイオン性を求めよ。

【14】  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  の結合角は、それぞれ  $109.5$ ,  $107.3$ ,  $104.5^\circ$  である。この傾向を C, N, O 原子の  $\text{sp}^3$  混成軌道を用いて説明せよ。