

## [ 無機化学 I (基礎) ] (全 2 題)

## [ 問題 1 ]

分子中の原子間距離は、結合の次数や結合エネルギーと深く関係している。

L. Pauling は、分子中の A-B 原子間距離  $D(A-B)$  と各原子の結合半径  $r_A$  および  $r_B$  (単位: Å) の間に次の関係を提唱した。

$$D(A-B) = r_A + r_B - 0.08|x_A - x_B|$$

ただし、 $x_A$  と  $x_B$  は各原子の電気陰性度である。

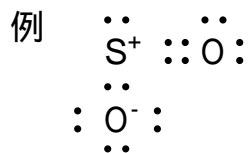
問 A 次の表を用いて、炭素 - 酸素原子間の一重結合、二重結合、三重結合に対応する原子間距離を計算せよ。

元素	一重結合半径 (Å)	二重結合半径 (Å)	三重結合半径 (Å)	電気陰性度
炭素	0.772	0.667	0.603	2.55
酸素	0.742	0.620	0.550	3.44

一酸化炭素分子中の炭素 - 酸素原子間距離の実測値は 1.130 Å である。これは、炭素 - 酸素間の結合が純粋な  重結合ではなく、 重結合が寄与していることを示している。

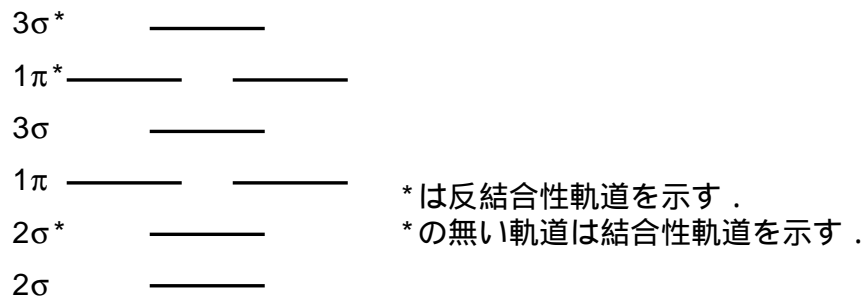
問 B a, b に当てはまる文字を答えよ。

問 C a, b の結合状態に相当する電子構造式を例にならって示せ。



問 D 二酸化炭素中の炭素 - 酸素原子間距離の実測値は 1.159 Å である。二酸化炭素中の炭素 - 酸素結合と一酸化炭素中の炭素 - 酸素結合を比べると、どちらの分子の結合エネルギーが大きいと考えられるか、理由をつけて答えよ (結合エネルギーの比較は結合 1 個あたりで行う)。

問E 一酸化炭素分子の2s, 2p電子が関与する分子軌道のエネルギー準位を以下の図のように近似する(各準位にはスピンの向きが異なる2個の電子が入ることができる)。この準位図に従うと、炭素-酸素間の結合は何重結合と考えられるか。理由をつけて答えよ。



[問題2]

以下の問に答えよ。問A, C, Dは考え方も示せ。

問A 金属セシウムは体心立方(bcc)構造をとり、20 °Cにおける密度は  $1.87 \text{ g cm}^{-3}$  である。20 °Cにおける金属セシウムの格子定数は何 Å と考えられるか。ただし、セシウムの原子量は133、アボガドロ数は  $6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  として計算せよ。

問B 結晶の格子定数を決めるのに最適な実験法は何か。

問C 金属セシウムを剛体球と仮定して金属半径(単位: Å)を計算せよ。

問D 金属セシウムが面心立方(fcc)構造をとったときの格子定数は何 Å と予想されるか。また、密度(単位:  $\text{g cm}^{-3}$ )はいくらになるか。ただし、bcc構造とfcc構造において金属半径は変わらないものとする。

問E 圧力を加えていくとbcc構造とfcc構造ではどちらが安定になると考えられるか。理由をつけて答えよ。