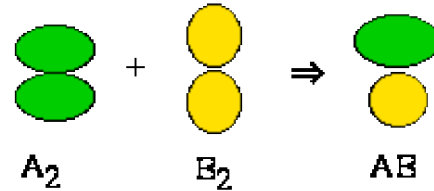


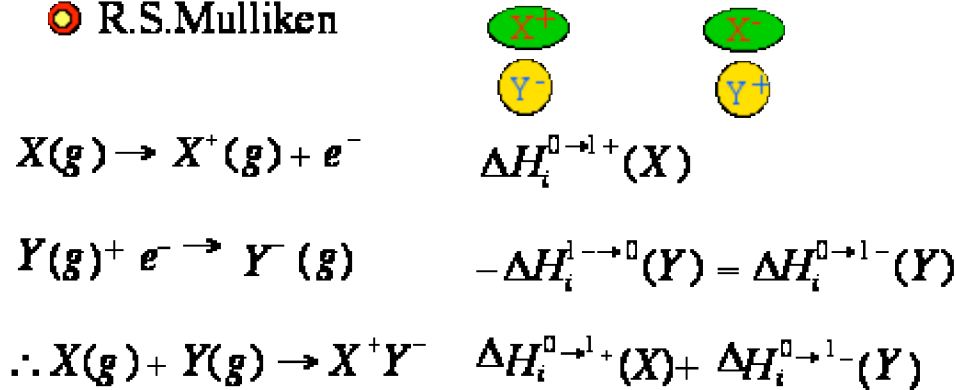
# 電気陰制度 の定義

● L. Pauling

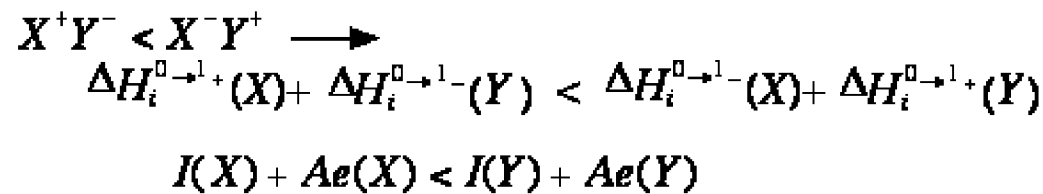
$$\Delta = \alpha(\chi_A - \chi_B)^2 = \epsilon(A-B) - \frac{\epsilon(A-A) + \epsilon(B-B)}{2}$$



● R. S. Mulliken



同様にして



$$\chi_M = \frac{I + Ae}{2}$$

# 電気陰性度の定義

- Pauling

$$\Delta = a(\chi_P^a - \chi_P^b)^2 = \varepsilon(A - B) - \frac{\varepsilon(A - A) + \varepsilon(B - B)}{2}$$

- Mulliken

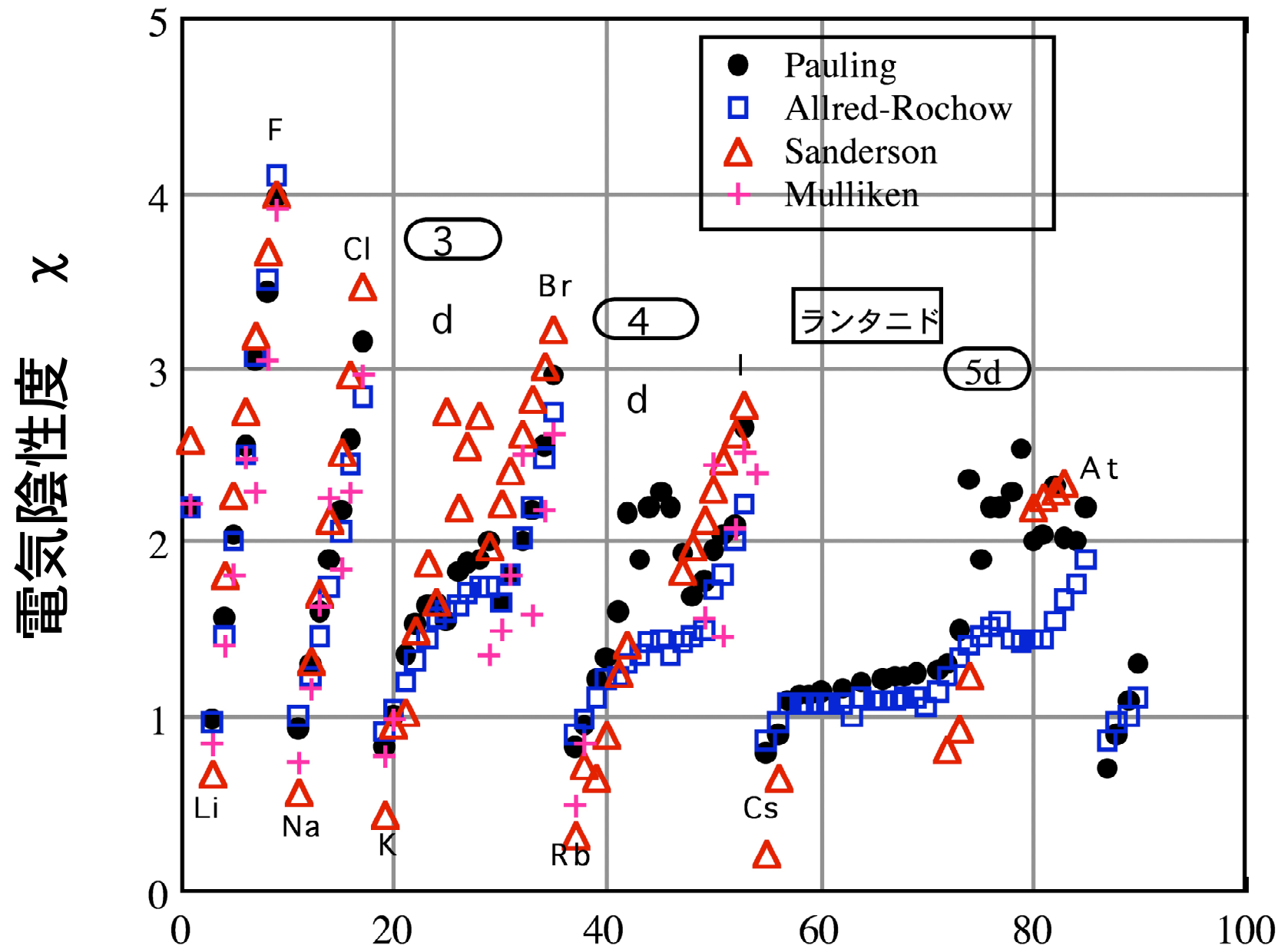
$$\chi_M = \frac{I + A_e}{2}$$

- Allred & Rochow

$$\chi_{AR} = 0.359 \frac{Z_{eff}}{r^2} \times 10^4 + 0.744$$

- Sanderson

$$\chi_S = \frac{D}{D_i} \quad D = \frac{Z}{\frac{4\pi r^3}{3}}$$



種々の電気陰性度の比較

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18			
1H 2.592 2.528	2A																2He			
												pブロック元素								
												3B	4B	5B	6B	7B				
3Li 0.670 1.285	4Be 1.810 2.112											5B 2.275 2.368	6C 2.746 2.602	7N 3.194 2.806	8O 3.654 3.001	9F 4.000 3.140	10Ne			
												dブロック元素								
11Na 0.560 1.175	12Mg 1.318 1.802	3A	4A	5A	6A	7A	8		1B	2B	13Al 1.714 2.055	14Si 2.138 2.296	15P 2.515 2.490	16S 2.957 2.700	17Cl 3.475 2.927	18Ar				
19K 0.445 1.047	20Ca 0.946 1.527	21Sc	22Ti	23V	24Cr	25Mn	26Fe	27Co	28Ni	29Cu 2.033 2.239	30Zn 2.223 2.341	31Ga 2.419 2.442	32Ge 2.618 2.540	33As 2.816 2.635	34Se 3.014 2.726	35Br 3.219 2.817	36Kr			
37Rb 0.312 0.877	38Sr 0.721 1.333	39Y	40Zr	41Nb	42Mo	43Tc	44Ru	45Rh	46Pd	47Ag 1.826 2.122	48Cd 1.978 2.208	49In 2.138 2.296	50Sn 2.298 2.380	51Sb 2.458 2.461	52Te 2.618 2.540	53I 2.778 2.617	54Xe			
55Cs 0.220 0.736	56Ba 0.651 1.267	57La	72Hf	73Ta	74W	75Re	76Os	77Ir	78Pt	79Au	80Hg 2.195 2.326	81Tl 2.246 2.353	82Pb 2.291 2.376	83Bi 2.342 2.403	84Po	85At	86Rn			
87Fr	88Ra	89Ac	104Rf	105Ha													カルコゲン 元素	ハロゲン 元素	不活性 元素	
sブロック元素 アルカリ元素		sブロック元素 アルカリ土類元素														fブロック元素				
ランタノイド				58Ce	59Pr	60Nd	61Pm	62Sm	63Eu	64Gd	65Tb	66Dy	67Ho	68Er	69Tm	70Yb	71Lu			
アクチノイド				90Th	91Pa	92U	93Np	94Pu	95Am	96Cm	97Bk	98Cf	99Es	100Fm	101Md	102No	103Lr			

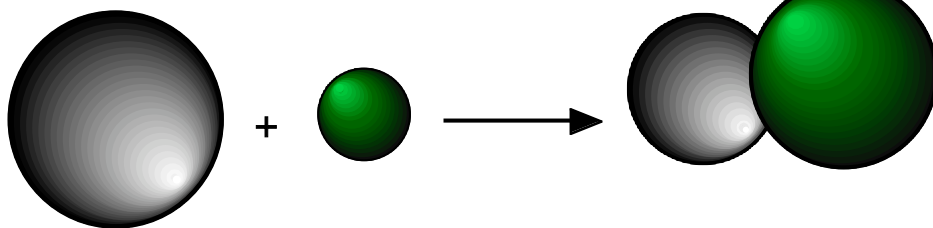
## Sandersonの $\chi_s$ と $\Delta\chi_s$

$\chi_s$  と  $\Delta\chi_s$

$$\Delta\chi_s = \sqrt{\chi_s} \quad (\text{R.T.Sanderson})$$

# Sandersonによる電気陰性度と化学結合

KCl分子の生成



Sandersonの例題

K	Cl
$\chi_s = 0.445$	$\chi_s = 3.475$
$\Delta\chi_s = 1.047$	$\Delta\chi_s = 2.927$
$r = 231pm$	$r = 99pm$
$r_{1+} = 133pm$	$r_{1-} = 181pm$



電気陰性度の均等化  $\longrightarrow \sqrt{\chi_s^A \cdot \chi_s^B} = \chi_s(eqli.)$

$$= \sqrt{0.445 \cdot 3.475}$$

$$= 1.244$$

Kの  $\chi_s$

$$0.445 \longrightarrow 1.244$$

$$\Delta\chi_s = +0.799$$

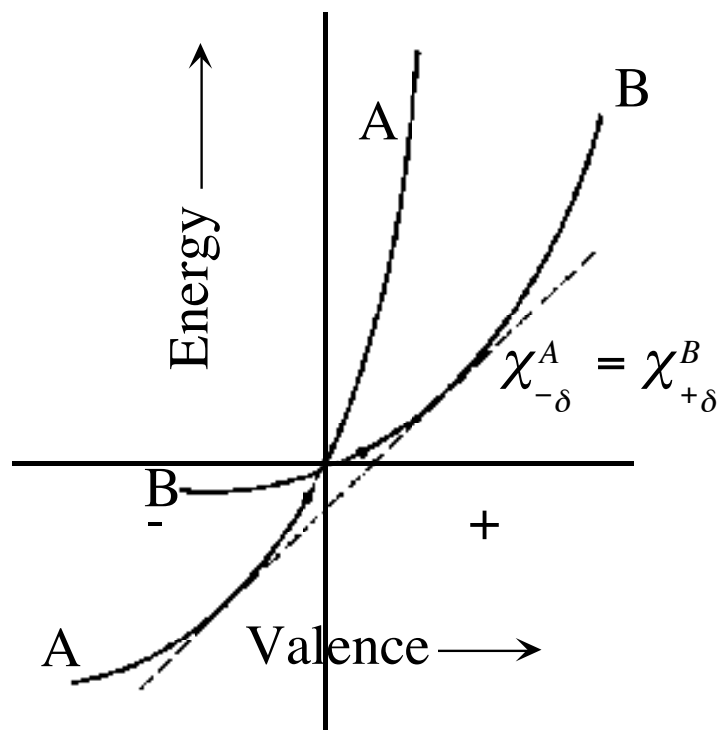
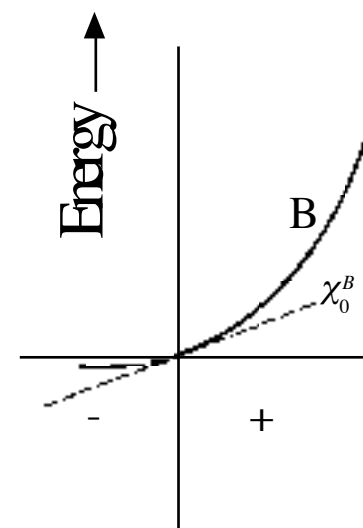
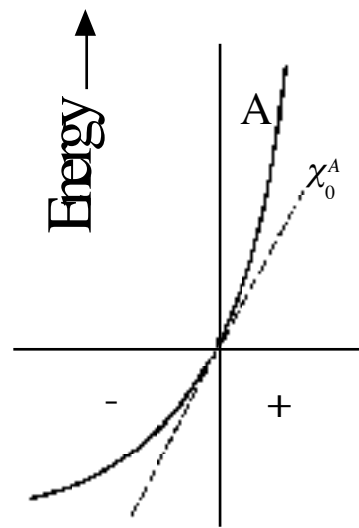
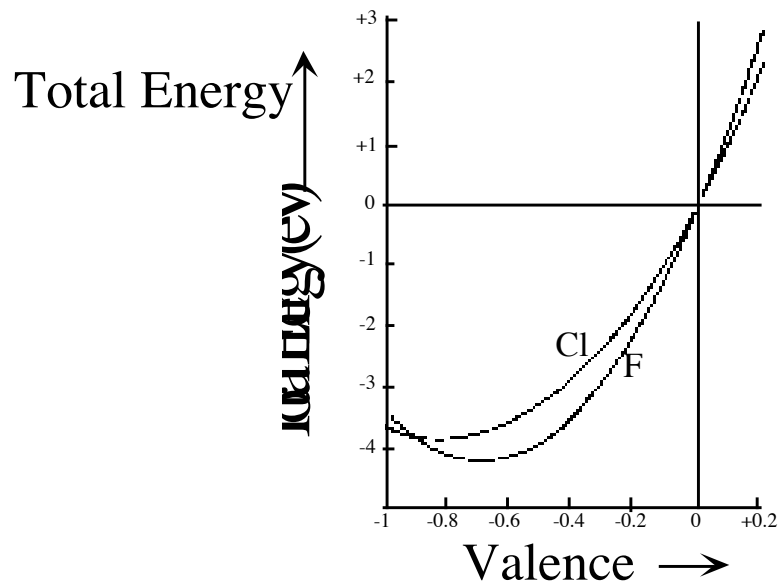
$$+\delta = \frac{0.799}{1.047} = 0.763$$

Clの  $\chi_s$

$$3.475 \longrightarrow 1.244$$

$$\Delta\chi_s = -2.231$$

$$-\delta = \frac{-2.231}{2.927} = -0.762$$



電子親和力  
イオン化エネルギー曲線  
と  
電気陰性度