

裏面にも出題および(参考)原子番号表があります。

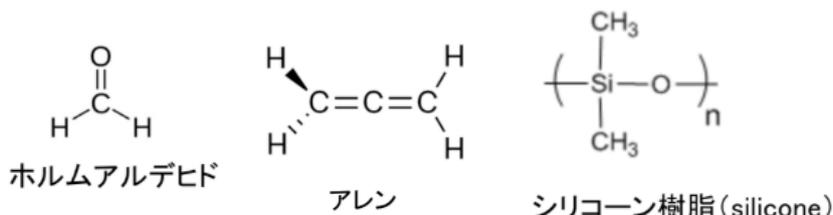
- 【1】NO、NO⁺、NO⁻の分子軌道準位は次のように表される。ただしエネルギー準位の高低を < や = で示している。

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2px} = \pi_{2py} < \sigma_{2pz} < \pi_{2px}^* = \pi_{2py}^* < \sigma_{2pz}^*$$

(1) NOの電子配置を、 $\sigma_{1s}^2 \dots$ の形式で記せ。

(2) NO、NO⁺、NO⁻の結合次数を求め、どの結合が最も強いかを答えよ。

- 【2】次の分子の非水素原子のそれぞれについて混成状態を記せ。



- 【3】14族元素のダイヤモンド構造をもつ単体結晶について、格子定数、結合解離エネルギー、バンドギャップ E_g は右表のようになっている。

表3・1 第14族のダイヤモンド構造をもつ元素に見られる周期的な傾向

元素	格子定数/Å	結合解離エネルギー/kJ mol ⁻¹	E_g /eV
C(ダイヤモンド)	3.57	346	5.4
Si	5.43	222	1.1
Ge	5.66	188	0.66
α -Sn	6.49	146	0.1

- (1) 結合解離エネルギーと E_g の関係を記し、そのようになることの理由を簡潔に述べよ。
- (2) 共有結合性結晶と金属結合性結晶はそれぞれ E_g の大きさとどのように関連づけられるか。
- (3) 一般に結晶を加圧すれば格子定数は小さくなる。共有結合は強くなるか、弱くなるか。
- (4) Ge結晶を加圧したとき、 E_g にどのような変化が見られるかを予想せよ。

- 【4】(a) 以下の記述の ア ~ ク に当てはまる数値または式を答えよ。ただし、イ と エ は r を用いた数式である。

NaCl型イオン結晶について、一つのイオンを起点としてこのイオンから最も近い位置にあるイオンとの距離を r とする。この位置にあるイオンは ア 個ある。2番目に近い位置にあるイオンは イ 離れた位置にある ウ 個のイオンである。3番目に近いイオンは エ 離れた位置にある オ 個のイオンである。静電的相互作用によるポテンシャルエネルギー U は下記のように無限に続く級数で表される。ここで、 e は電気素量、 ϵ_0 は真空の誘電率であり、下式の カ、キ、ク はそれぞれ1, 2, 3番目に近い位置のイオンに対応する項とする。

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} (\text{カ} + \text{キ} + \text{ク} + \dots)$$

- (b) 結晶格子エネルギーの実測値は、上記の計算から導かれた値とやや異なる。この違いの主な原因を述べよ。

- 【5】CuF₂結晶ではCu²⁺に6個のF⁻イオンが配位している。6つのCu-F結合のうち4つの結合長が193 pm、2つの結合長が227 pmである。このようになる理由を、d軌道準位および電子配置を図示して答えよ。結合長が異なることを定性的に説明できればよい。

【6】 CoCl_2 とアンモニアから錯イオン $[\text{Co}^{\text{II}}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ を合成できる。しかしこれは比較的不安定であり、容易に酸化されて安定な錯イオン $[\text{Co}^{\text{III}}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ になる。

- (a) Co および Co^{3+} の電子配置を、 $1s^2 \dots$ の形式で記せ。
- (b) $[\text{Co}^{\text{III}}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ は反磁性である。3d 軌道の分裂様式と電子配置を書け。
- (c) 6 配位 Co^{3+} イオンは d^2sp^3 の混成状態が考えられる。箱型モデルでこれを説明せよ。
- (d) 配位子から計 12 電子を受けるとして、箱モデルを使った Co^{3+} の電子配置からこの錯イオンの安定性を説明せよ。

【7】 次の語句を 2 行程度で説明せよ。絵を使ってもよい。

- (1) VSEPR (2) HSAB (3) $Y_l^m(\theta, \varphi)$ (4) Nernst equation (5) Perovskite

原子番号	元 素 名	元素記号	原 子 量	原子番号	元 素 名	元素記号	原 子 量
1	水	H	1.008	58	セリウム	Ce	140.1
2	ヘリウム	He	4.003	59	プラセオジウム	Pr	140.9
3	リチウム	Li	6.941*§	60	ネオジウム	Nd	144.2
4	ベリリウム	Be	9.012	61	プロメチウム	Pm	(145)
5	ホウ素	B	10.81	62	サマリウム	Sm	150.4
6	炭素	C	12.01	63	ユロビウム	Eu	152.0
7	窒素	N	14.01	64	ガドリニウム	Gd	157.3
8	酸素	O	16.00	65	テルビウム	Tb	158.9
9	フッ素	F	19.00	66	ジスプロシウム	Dy	162.5
10	ネオン	Ne	20.18	67	ホルミウム	Ho	164.9
11	ナトリウム	Na	22.99	68	エルビウム	Er	167.3
12	マグネシウム	Mg	24.31	69	ツリウム	Tm	168.9
13	アルミニウム	Al	26.98	70	イッテルビウム	Yb	173.1
14	ケリウム	Si	28.09	71	ルテチウム	Lu	175.0
15	リン	P	30.97	72	ハフニウム	Hf	178.5
16	硫黄	S	32.07	73	タンタル	Ta	180.9
17	塩素	Cl	35.45	74	タングステム	W	183.8
18	アルゴン	Ar	39.95	75	レニウム	Re	186.2
19	カリウム	K	39.10	76	オスミウム	Os	190.2
20	カルシウム	Ca	40.08	77	イリジウム	Ir	192.2
21	スカンジウム	Sc	44.96	78	白金	Pt	195.1
22	チタン	Ti	47.87	79	金	Au	197.0
23	バナジウム	V	50.94	80	水銀	Hg	200.6
24	クロム	Cr	52.00	81	タリウム	Tl	204.4
25	マンガン	Mn	54.94	82	鉛	Pb	207.2
26	鉄	Fe	55.85	83	ビスマス	Bi	209.0
27	コバルト	Co	58.93	84	ポロニウム	Po	(210)
28	ニッケル	Ni	58.69	85	アスタチン	At	(210)
29	銅	Cu	63.55	86	ラドン	Rn	(222)
30	亜鉛	Zn	65.38*	87	フランシウム	Fr	(223)
31	ガリウム	Ga	69.72	88	ラジウム	Ra	(226)
32	ゲルマニウム	Ge	72.63	89	アクチニウム	Ac	(227)
33	ヒ素	As	74.92	90	トリウム	Th	232.0
34	セレン	Se	78.96†	91	プロトアクチニウム	Pa	231.0
35	臭素	Br	79.90	92	ウラン	U	238.0
36	クリプトン	Kr	83.80	93	ネプツニウム	Np	(237)
37	ルビジウム	Rb	85.47	94	プルトニウム	Pu	(239)
38	ストロンチウム	Sr	87.62	95	アメリシウム	Am	(243)
39	イットリウム	Y	88.91	96	キュリウム	Cm	(247)
40	ジルコニウム	Zr	91.22	97	バークリウム	Bk	(247)
41	ニオブ	Nb	92.91	98	カリホルニウム	Cf	(252)
42	モリブデン	Mo	95.96*	99	アインスタイニウム	Es	(252)
43	テクネチウム	Tc	(99)	100	フェルミウム	Fm	(257)
44	ルロジウム	Ru	101.1	101	メンデレビウム	Md	(258)
45	ロジウム	Rh	102.9	102	ノーベリウム	No	(259)
46	パラジウム	Pd	106.4	103	ローレンシウム	Lr	(262)
47	銀	Ag	107.9	104	ラザホージウム	Rf	(267)
48	カドミウム	Cd	112.4	105	ドブニウム	Db	(268)
49	インジウム	In	114.8	106	シーボーギウム	Sg	(271)
50	スズ	Sn	118.7	107	bohrium	Bh	(272)
51	アンチモン	Sb	121.8	108	hassium	Hs	(277)
52	テルル	Te	127.6	109	meitnerium	Mt	(276)
53	ヨウ素	I	126.9	110	darmstadtium	Ds	(281)
54	セシウム	Xe	131.3	111	rentgenium	Rg	(280)
55	バリウム	Cs	132.9	112	copernicium	Cn	(285)
56	ラジウム	Ba	137.3	114	flerovium	Fl	(289)
57		La	138.9	116	livermorium	Lv	(293)