

2.3. 入射エネルギー、21.2 eV; 放出電子のエネルギー、7.18 eV。ゆえに、 $IE(Kr) = 14.0$ eV。

例題 3.7.

LiF の格子エネルギーを Born 指数 n を含めた格子エネルギーの式から求める。 n は平均値 6 を使う。 $U(\text{LiF}) = -1007 \text{ kJ mol}^{-1}$ 。Born-Habor サイクルから、 $EA(\text{F}) = -409.9 \text{ kJ mol}^{-1}$ 。単位換算は $1 \text{ eV} = 96.48 \text{ kJ mol}^{-1}$ を用いて、 -4.2 eV (なお教科書によっては -1 倍して、 $EA(\text{F}) = 4.2 \text{ eV}$ と表現するものもある)。

NaI の格子エネルギーも同様に、 n の平均値 9.5 を使って、 $U(\text{NaI}) = -672.5 \text{ kJ mol}^{-1}$ 。さらに EA も同様にして求めて、 $EA(\text{I}) = -326.1 \text{ kJ mol}^{-1} = -3.4 \text{ eV}$ 。

例題 3.9. (1) 体心立方格子 (2) 2 個 (3) 122。 $w/V = d$; なお、単位換算における桁に注意のこと。

3.4. $w/V = d$ から、 $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 。

3.10. 例題 3.7. と同様。 $EA(\text{F}) = -330.9 \text{ kJ mol}^{-1} = -3.43 \text{ eV}$ 。

3.13. サイクルを描いてみると、
 $U + \Delta H(\text{NaCl の水への溶解熱}) = \Delta H(\text{Na}^+ \text{水和}) + \Delta H(\text{Cl}^- \text{水和})$
従って、 $\Delta H(\text{NaCl の水への溶解熱}) = 11.9 \text{ kJ mol}^{-1}$ 。

3.17. (1) 4 個、1 2 個、 (2) 5.89×10^{22} 個、 (3) $19.3 \times 6.02 \times 10^{23} / 5.89 \times 10^{22} = 197$ 。

3.18. 格子定数 $a = 5.42 \text{ \AA}$ 。 $r = a \times \sqrt{2}/4 = 1.92 \text{ \AA}$ 。

【補足説明 1】 光電効果の原理に基づく分光学と分析化学

紫外光電子分光 (UPS; UV photoelectron spectroscopy)

X 線光電子分光(XPS; X-ray photoelectron spectroscopy または ESCA; Electron spectroscopy for chemical analysis)

UPS や XPS (ESCA) は、真空中の試料表面に紫外線または軟 X 線を照射し、放出される光電子の運動エネルギーの分布を測定する手法である。ヒントの挿絵の通り、固体中での電子の束縛エネルギー W 「仕事関数」が、 $W = h\nu - E_k$ として求まる。UPS の場合、被占準位 (HOMO とその周辺) の電子構造がわかる。原子のイオン化エネルギー(IE)等は実際にはこのような分光学的手法により決定されている。X 線は UV よりエネルギーが大きいので、ボーアモデルからわかるように、深い (内殻の) 電子を叩くことができる。これが UV と X 線の使い分けの理由である。原理は同じ。

【補足説明 2】 Born-Haber サイクルの非常に重要な適用例

原子の電子親和力 (EA) も実際には直接測定することではなく、このように他の実験値を代用して求められている。