

- (1) KCl の核間距離は 3.14 Å である。Slater の規則 (遮蔽パラメーターを用いて Z_{eff} を近似的に求めること) を用いて、それぞれのイオンの半径を求めよ。
- (2) 主量子数の代わりに「有効主量子数 n_{eff} 」を用いるとさらに IE 等の計算と実測との一致が向上する。これも遮蔽の効果を取り入れたもので、軌道半径は n^2 程には広がらないという現実に合わせて補正である。特に、 n が大きい領域で効く。 $n_{\text{eff}} = 1.0 (n=1), 2.0 (2), 3.0 (3), 3.7 (4), 4.0 (5), 4.2 (6)$ 。

2・1 Slater の規則を用いて、次の原子のしゃへい定数、有効核電荷、第一イオン化エネルギーを計算せよ。

- (1) ${}_{19}\text{K}$, (2) ${}_{23}\text{V}$, (3) ${}_{5}\text{B}$, (4) ${}_{55}\text{Cs}$

- (3) 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

- (4) CsCl の核間距離は 2.90 Å であり、その双極子モーメントは 10.5 D である。この分子のイオン性を求めよ。

- (5) 次表の結合エネルギー D を用いて、H 原子と Cl 原子の電気陰性度を求めよ。

ただし、F の電気陰性度は 4.0 とする。

Pauling の定義で解いて下さい

表 2・5

	H_2	F_2	Cl_2	HF	HCl
$D[\text{kJ mol}^{-1}]$	436	155	243	566	431

- (6) O_2 の分子軌道の電子配置を、 $\sigma_{1s}^2 \dots$ の様式に従って記せ。次に O_2 がビラジカルであることを説明せよ。酸素は 8 番原子である。
- (7) Mo_2 は 6 重結合を持つとされている。関係する軌道を図示し、電子配置を示せ。
参考: ${}_{42}\text{Mo}$ の基底電子配置は、 $[\text{Kr}] 4d^5 5s^1$
(4d と 5s において、Hund 則が支配的になった結果である)
- (8) 単体が示す性質として、金属と (真性) 半導体の違いを、(1) 電導性の温度依存性、(2) バンド、(3) 周期表上の元素の性質の 3 つの立場から、説明せよ。各 1 行程度。
- (9) ゲルマニウムの電導率 σ を温度を変えつつ測定し、縦軸に $\ln \sigma$ ($\log_e \sigma$)、横軸に $1/T$ のプロットを描くと、 $-4.35 \times 10^3 \text{ K}$ の勾配をもつ直線となった。このゲルマニウムのバンドギャップは何 eV か。なお、フェルミエネルギーはギャップの丁度真ん中に位置するために、 $2E_a = E_g$ となる、とせよ。
- (10) 次の核反応式の括弧の中を埋めよ。
(i) ${}^{14}\text{N} + {}^4\text{He} \rightarrow {}^{17}\text{O} + ()$ (ii) ${}^9\text{Be} + {}^4\text{He} \rightarrow {}^{12}\text{C} + ()$
(iii) ${}^{27}\text{Al} + n \rightarrow {}^{27}\text{Mg} + ()$ (iv) ${}^9\text{Be} + p \rightarrow () + \alpha$ (v) ${}^{209}\text{Bi} + {}^{70}\text{Zn} \rightarrow () + n$
- (11) ある試料の放射能が 1 日で初めの 66.5% に低下したとすると、その試料の半減期は何日か。