

原子番号と元素記号の対応は、 $Z=1$  (H) から 36 (Kr) まで順に以下の通りである。

H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr.

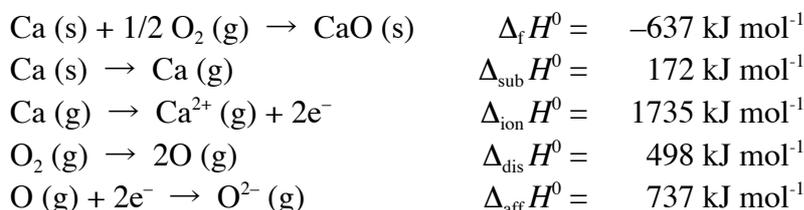
【1】 VSEPR (価電子殻電子対反発) に基づいて、分子構造を予想せよ。



【2】 量子化学的に定められる結合次数を用いて、NO、NO<sup>+</sup>、NO<sup>-</sup> の結合の強さを比べよ。

【3】 NaCl 型結晶の限界半径比を求めよ。

【4】 酸化カルシウムの格子エネルギーを、以下に示すデータを用いて計算せよ。エネルギー準位図を描くこと。



【5】 「スイスのロザンヌポリテク大学は 2016 年 6 月 9 日、セルの寸法がほぼ SD カード大のペロブスカイト太陽電池を、塗布プロセスに簡易な真空プロセスを組み合わせた手法で試作し、変換効率 20% 超を達成したと発表した。成果は学術誌 *Science* に掲載された」 (日経テクノロジーonline から)

この物質は  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{PbI}_3$  である。I の代わりに Br や Cl を用いた誘導体もある。このペロブスカイト結晶の単位胞の概形を描いてみよ。メチルアンモニウム部分は 1 価陽イオンであり、配位結合ではなくクーロン力で接触していると考えよ。

【6】  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$  の  $\Delta_{\text{oct}}$  およびスピ対形成に必要なエネルギー  $P$  は、 $\Delta_{\text{oct}} = 7800 \text{ cm}^{-1}$ ,  $P = 25500 \text{ cm}^{-1}$  である。この  $\text{Fe}^{2+}$  における基底電子配置は、高スピンか低スピンか？ (a) 低スピンと高スピンのそれぞれの電子配置を描き、(b) 結晶場安定化エネルギーをそれぞれ  $\Delta_{\text{oct}}$  と  $P$  で表し、(c) 最後にそれらの大きさを比較することにより答えよ。

【7】  $\text{Cu}^{2+}$  の錯体は、ほとんどの場合 6 配位八面体構造の一つの結合軸を長くしている。ときには 2 つの配位子が無限大に遠ざかり、平面 4 配位となっている。

(1) 結晶場分裂に基づいて、(a) 正八面体のときと (b) 引き伸ばされた八面体のときの d 軌道準位を模式的に描け。各軌道には名称 ( $3d_{xy}$  等) を記せ。

(2) なぜ八面体から歪むのかを説明せよ。

(3) この歪みは、何と呼ばれているか。

【8】 次の語句を 2 行以内で説明せよ。絵を使ってもよい。

- (1) Madelung 定数 (2) Mulliken の定義による電気陰性度 (3) 金属的電導挙動  
(4) 共鳴と平衡の違い (5) Moseley の法則 (6) HSAB (7)  $\Delta$ - $\Lambda$  異性 (8) 逆供与