

(無機化学 I・4 枚中の 1 枚目)

[無機化学 I(基礎)] (全 2 題)

[問題 1]

以下の問 A ~ 問 D に答えよ。

問 A

- (1) 「第一イオン化エネルギー」とは何か、50 字程度で説明せよ。
- (2) 希ガスを除く原子番号 1 ~ 20 の元素の第一イオン化エネルギーのグラフとして適当なものを図 1 の (a) ~ (l) の中から選べ (縦軸の単位は MJ/mol とする)。また、その図を選んだ理由を簡潔に述べよ。

問 B

- (1) 「Pauling の電気陰性度」とは何か、100 字程度で説明せよ。
- (2) 希ガスを除く原子番号 1 ~ 20 の元素に対する Pauling の電気陰性度のグラフとして適当なものを図 1 の (a) ~ (l) の中から選べ。また、その図を選んだ理由を簡潔に述べよ。

問 C

- (1) 「有効核電荷」とは何か、100 字程度で説明せよ。
- (2) 希ガスを除く原子番号 1 ~ 20 の元素の最外殻電子に対する有効核電荷 (SCF 波動関数から求めたもの) のグラフとして適当なものを図 1 の (a) ~ (l) の中から選べ。また、その図を選んだ理由を簡潔に述べよ。

(無機化学I・4枚中の2枚目)

問D

- (1) 希ガスを除く原子番号 1 ~ 20 の元素の原子半径 (非金属元素については共有半径、金属元素については金属半径) のグラフとして適当なものを図 1 の (a) ~ (l) の中から選べ (縦軸の単位は \AA とする)。また、その図を選んだ理由を簡潔に述べよ。
- (2) 希ガスを除く原子番号 1 ~ 20 の元素の希ガス電子配置でのイオン半径 (6 配位) のグラフとして適当なものを図 2 の (m) ~ (o) の中から選べ (黒丸は陽イオン、白丸は陰イオンとする。縦軸の単位は \AA とする)。また、その図を選んだ理由を簡潔に述べよ。

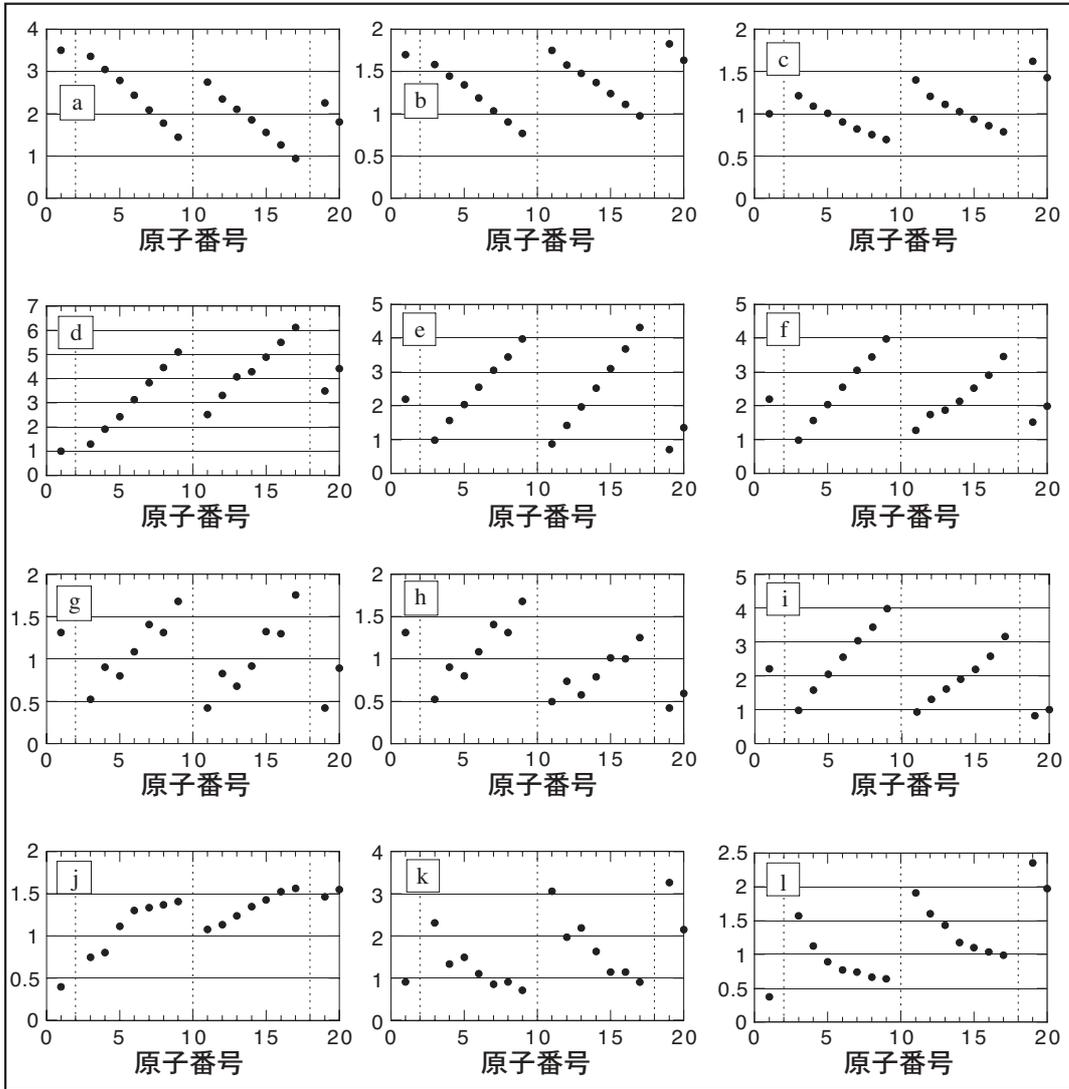


図 1

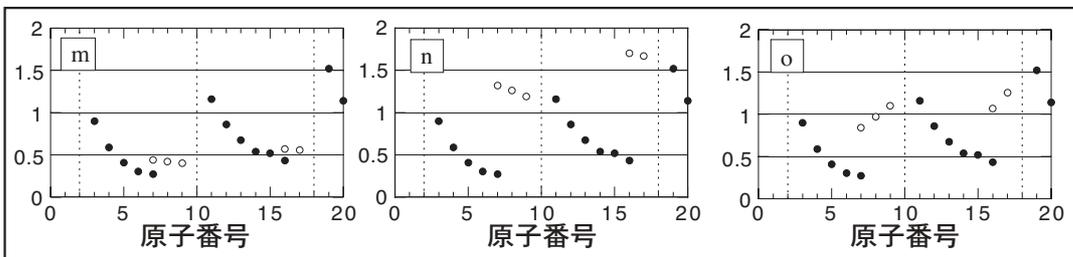


図 2

[問題 2] 次の文章中の空欄 (1) ~ (6) を数字または数式でうめよ。

イオン結晶は静電相互作用 $\pm q^2/r$ によって形成される。まずイオン結合した 2 つの原子を考える。レナードジョーンズ型の斥力エネルギー $+\sigma/r^{12}$ を考慮すると、距離 R にある $+q, -q$ の電荷をもつ正負イオンのエネルギーは q, R, σ を用いて

$$U = \{ (1) \}$$

となる。平衡距離 R_0 を用いて上式は

$$U = (-q^2/R_0) \times \{ (2) \}$$

とかける。

次に間隔 R で正負 ($+q, -q$) 交互に並んだ一次元の無限イオン列を考える。一つのイオンの関与する静電相互作用エネルギーは q と R を用いて

$$V_i = \{ (3) \}$$

となる。ここで級数 $\ln(1+x) = x - x^2/2 + x^3/3 - x^4/4 + \dots$ を用いよ。

上と同様の斥力を最近接間のみ考慮すると、一つのイオンの関与するエネルギーは q, R, σ を用いて

$$U_i = \{ (4) \}$$

である。無限列の一部 $2N$ 個のイオンのエネルギーは $U_{tot} = NU_i$ である。平衡距離 R_0 を用いて U_{tot} を表わすと、

$$U_{tot} = (-Nq^2/R_0) \times \{ (5) \}$$

となる。無限列の平衡距離 R_0 は 2 原子の場合と比べて $\{ (6) \}$ 倍である。