

(1 枚目 15 点, 2 枚目 15 点, 3 枚目 8 点, 4 枚目 12 点, 計 50 点満点)

問 1 架空のイオン結晶 Xe^+Cl^- について考える。ただし、 Cl^- のイオン半径は 1.81×10^{-10} m, Xe^+ のイオン半径は 1.20×10^{-10} m, 結晶構造は NaCl 型とする。(計 10 点)

- (1) これらのイオンが剛体球と近似できるなら, この XeCl 結晶の格子定数 (単位格子の一辺の長さ) はいくらになるか? (2 点)
- (2) この結晶の格子エネルギーを, 次のボルン-マイヤーの式で計算せよ。ただし物理定数の値は $N_A = 6.02 \times 10^{23} [\text{mol}^{-1}]$, $e = 1.60 \times 10^{-19} [\text{C}]$, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} [\text{C}^2/\text{J} \cdot \text{m}]$, NaCl 構造のマーデルング定数 A は 1.75, d は接している $\text{Xe}^+ - \text{Cl}^-$ 間の距離 [m], d^* は補正のための定数 (0.345×10^{-10} m) である。※単位も忘れずに! (4 点)

$$E = \frac{N_A |Z_A Z_B| e^2}{4\pi\epsilon_0 d} \left(1 - \frac{d^*}{d}\right) \times A$$

- (3) 気体の Xe (1 mol) と 気体の Cl_2 (1/2 mol) から, このイオン結晶 Xe^+Cl^- (1 mol) ができるときに生じる熱を求めよ。発熱反応の場合は正の値, 吸熱反応の場合は負の値として解答すること。なお, 必要に応じて以下の数値を使用すること (不必要な数値も記載しているので, すべてを使う必要があるわけではない)。 (4 点)

Xe の蒸発熱: 12.6 kJ/mol, Cl_2 の蒸発熱: 20.4 kJ/mol,

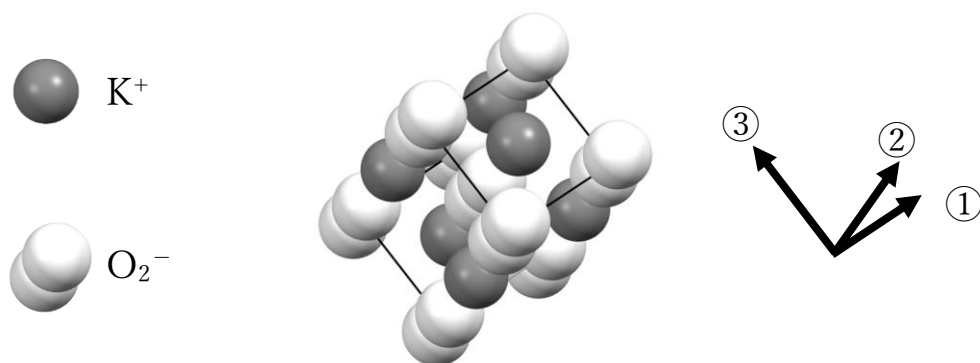
Xe の第一イオン化エネルギー: 1170 kJ/mol, Cl の第一イオン化エネルギー: 1251 kJ/mol

Cl-Cl 単結合の結合エネルギー: 239 kJ/mol,

Xe の電子親和力: -77 kJ/mol, Cl の電子親和力: 349 kJ/mol

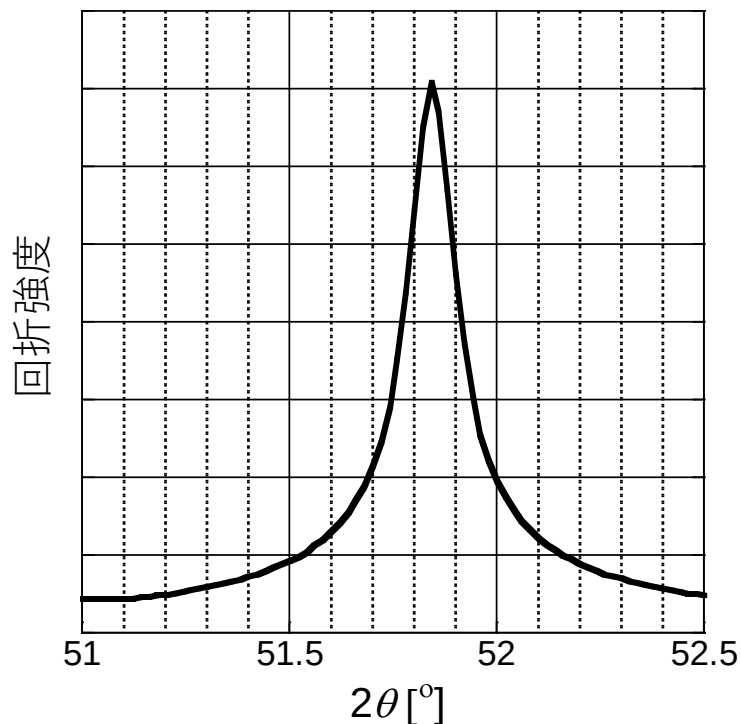
問 2 金属 Ni は面心立方構造であり, 格子定数は $a = b = c = 3.52 \times 10^{-8}$ cm, 密度は 8.90 g/cm³ である。これらの値とアボガドロ定数 6.02×10^{23} から, Ni の原子量を計算せよ。(5 点)

問3 次の図は、超酸化カリウム (K^+ と O_2^- からなる KO_2 という組成の物質) の結晶構造である。この構造では、単位格子の原点 $(0, 0, 0)$ と $(1/2, 1/2, 1/2)$ の位置に O_2^- が位置し、 K^+ は図中②の軸方向に並ぶ O_2^- イオンのちょうど中央に存在している。また格子定数は $a = b = 3.964 \times 10^{-8} \text{ cm}$, $c = 6.775 \times 10^{-8} \text{ cm}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ である。この構造をもとに、以下の問いに答えよ。(計 15 点)



- (1) c 軸は上図右の①, ②, ③のどの方向に相当するかを答えるとともに、そのように判断できる構造的な理由を記せ。(2 点)
- (2) この単位格子 1 つに含まれる K^+ と O_2^- (O 原子の数ではなく、 O_2^- イオンとしての数なので間違えないように!) はそれぞれいくつか。(両方あっていて 2 点)
- (3) この結晶は、三斜晶系、単斜晶系、直方晶系、正方晶系、三方晶系、六方晶系、立方晶系のうちどの晶系か?(2 点)
- (4) この結晶は、単純格子、底心格子、面心格子、体心格子のどれになるか?(2 点)
- (5) この結晶には、4 回軸と、(4 回軸ではない) 2 回軸が存在する。それぞれの軸が存在する場所を 1 つずつ答えよ。解答は、座標で書いてもよいし(例えば、「 $a = \text{〇〇}$, $b = \text{××}$ の位置を通り ab 面に垂直な軸」など)、間違いようのない図で書いてもよい。※それぞれ 2 つ以上の軸があるが、4 回軸と 2 回軸をそれぞれ 1 ずつ答えればよい。(各 2 点 $\times 2$, 計 4 点)
- (6) この構造と、原子量 ($\text{K} = 39.10$, $\text{O} = 16.00$), アボガドロ定数 6.022×10^{23} を用い、超酸化カリウムの密度を求めよ。解答に際しては、有効数字や単位にも注意すること。(3 点)

問 4 次のグラフは、単純立方構造をもつ架空の結晶の粉末に対し、Cu の特性 X 線 ($K\alpha$, 波長 $1.54056 \times 10^{-10} \text{ m}$) を用い粉末 X 線回折測定を行った際の指数 (110) のピークを拡大したものである。これに関し、下の問 (1), (2) に答えよ。(計 8 点)



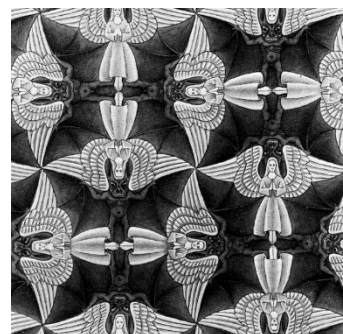
- (1) この物質の単位格子の格子定数を、有効数字 3 桁で求めよ。(4 点)
- (2) もし Mo の $K\alpha$ (波長: $0.71069 \times 10^{-10} \text{ m}$) を線源としてこの金属の粉末 X 線回折を行ったとすると、同じく指数 (110) のピークは 2θ がいくつの角度に現れるか (θ ではなく 2θ なので、間違えないように!). 有効数字 3 桁で答えよ。(4 点)

学籍番号：

氏名：

※この問題は用紙最下部の図に直接書き込み、この用紙を解答用紙として提出すること！

問5 版画家/画家であるエッシャーは結晶学に刺激を受け、さまざまな繰り返し構造をモチーフとする作品を残している。そのひとつが右図となる。この絵を同一パターンの2次元繰り返し（2次元結晶）とみなし、以下の問いに答えよ。なお、 n 回軸や鏡映面が複数存在する場合でも、そのうちの一つを解答すればよい（各4点、計12点）



- (1) この2次元パターンに、紙面に垂直な鏡映面を一つ書き入れよ。
- (2) この2次元パターンに、紙面に垂直な2回軸を一つ書き入れよ（「◎」を場所を示す記号として書き込め）。ただし、4回軸でもあるものは除く。
- (3) この2次元パターンに、紙面に垂直な4回軸を一つ書き入れよ（「☆」を書き込め）。

【解答記入用の図（右図）】

- ・ 鏡映面の場所に線を記入
- ・ 2回軸の場所に◎を記入
- ・ 4回軸の場所に☆を記入

