

## 固体化学 演習問題 No.2

1. KCl 結晶の原子間距離は  $3.14 \text{ \AA}$  である。有効核電荷を計算し、それを用いて  $\text{K}^+$  と  $\text{Cl}^-$  のイオン半径を求めよ。また同じデータを用い、 $\text{Ca}^{2+}$  と  $\text{S}^{2-}$  のイオン半径を求め、CaS 結晶の原子間距離を推定せよ。
2. NaH と LiH はいずれも  $\text{H}^-$  イオンが ccp 配列をし、陽イオンが全ての八面体サイトを占めている。NaH と LiH の格子定数はそれぞれ  $4.88 \text{ \AA}$  と  $4.08 \text{ \AA}$  である。 $\text{Na}^+$ 、 $\text{Li}^+$ 、 $\text{H}^-$  のイオン半径を計算せよ。
3. イオン間の反発ポテンシャルが  $E_{\text{rep}} = Be^{-r/\rho}$  で表されるとき、格子エネルギーを表す式を導け。
4. NaBr は NaCl 構造を有する。マードリング定数を用いて格子エネルギーを計算せよ。ただし、NaBr の原子間距離は  $2.9 \text{ \AA}$  である。
5. ボルン-ハーバーサイクルを用いて NaBr の格子エネルギーを求めよ。ただし、Na の昇華熱は  $109 \text{ kJmol}^{-1}$ 、Na のイオン化エネルギーは  $496 \text{ kJmol}^{-1}$ 、 $\text{Br}_2$  の解離エネルギーは  $190 \text{ kJmol}^{-1}$ 、Br の電子付着エンタルピー (対応する化学反応式は  $\text{Br} + e \rightarrow \text{Br}^-$ ) は  $-338 \text{ kJmol}^{-1}$ 、NaBr の標準生成熱は  $-361 \text{ kJmol}^{-1}$  である。
6. 反応  $2\text{NaI} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NaCl} + \text{I}_2$  に伴うエンタルピー変化を次の値を用いて求めよ。  
 $H_f^\circ(\text{Cl}, \text{気体}) = -246 \text{ kJmol}^{-1}$ ,  $H_f^\circ(\text{I}, \text{気体}) = -197 \text{ kJmol}^{-1}$   
 $U(\text{NaCl}) = 776 \text{ kJmol}^{-1}$ ,  $U(\text{NaI}) = 702 \text{ kJmol}^{-1}$
7. ボルン-ハーバーサイクルを用いて  $\text{O}(\text{g})$  に電子が付着して  $\text{O}^{2-}(\text{g})$  をつくる際のエネルギーを計算せよ。ただし、NaCl 型 MgO 中の Mg-O 距離は  $2.105 \text{ \AA}$ 、 $H_f^\circ(\text{MgO}, \text{固体}) = -602 \text{ kJmol}^{-1}$ 、Mg の昇華熱は  $150 \text{ kJmol}^{-1}$ 、 $H_f^\circ(\text{O}, \text{気体}) = 497 \text{ kJmol}^{-1}$ 、Mg のイオン化熱は  $2188 \text{ kJmol}^{-1}$ 。
8. NaCl 構造、閃亜鉛鉱構造、螢石構造、ウルツ鉱構造及びヒ化ニッケル構造について各結晶中の原子間距離を格子定数 ( $a$  や  $c$ ) を用いて表せ。
9.  $\text{ReO}_3$  構造を図示し、ペロブスカイト構造との比較をせよ。
10.  $\text{CdCl}_2$  構造と  $\text{CdI}_2$  構造について、それぞれの構造を図示し、互いの類似点と相違点を説明せよ。それぞれの構造について晶系および原子座標を示せ。