

## 固体化学 小テスト No. 2-6 (H28.12.20)

$n$  値=5(He 殻), 7(Ne 殻), 9(Ar 殻),  $N_A=6.022045 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ,  
 $e=1.6021892 \times 10^{-19} \text{ C}$ ,  $\epsilon_0=8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1} \text{ J}^{-1}$

1. 次の問に答えよ.

(1) ZnS (Zinc Blend 型) 結晶における Zn-S 距離を格子定数  $a$  の関数として求めよ.

(2) ZnS 結晶 (Zinc Blend 型) の格子定数を  $5.411 \text{ \AA}$  とする. ポーリングのイオン半径の考え方 (比例定数はどのイオンについても同じと仮定する) を用いて同じ構造の GaP 結晶の格子定数を推定せよ.

(3) GaP の格子定数の実測値は  $5.446 \text{ \AA}$  である. (2) 求めた値と比較してどのようなことが導かれるか.

2. 次の問に答えよ.

(1) 正八面体六配位のイオン半径比の下限値を求めよ.

(2) 正八面体六配位のイオン半径比の下限値を求めよ.

(3)  $\text{MX}_2$  型の構造を 2 つ挙げ, それぞれの陰イオンの配位数を答えよ.

(4) 下記の表を参考にして(3)の 2 つの構造を有すると思われるイオン結晶を推定せよ.

イオン半径	III 配位	IV 配位	VI 配位	VIII 配位
$\text{Cl}^-$	1.16	1.67		
$\text{O}^{2-}$	1.22	1.24		
$\text{Be}^{2+}$			0.41	0.59
$\text{Sr}^{2+}$			1.32	1.40
$\text{Mn}^{4+}$			0.67	0.80

学籍番号 \_\_\_\_\_ 氏名 \_\_\_\_\_

3. CsCl 結晶について書きの問に答えよ.

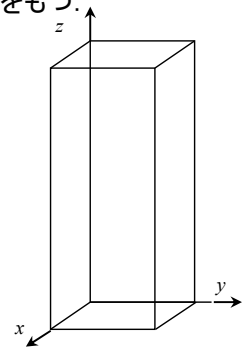
(1) CsCl 構造の静電ポテンシャルについて最初の 4 つの項までを級数の形で示せ.

4. アルカリ金属フッ化物において生成エンタルピーはリチウムからセシウムに変化するにつれて大きくなる. ボルン-ハーバーサイクルを用いて合理的に説明せよ.

5.  $\text{LiTiS}_2$  は六方晶系の構造 (表) をもつ.

(1) 結晶構造を書け.

	座標
Li	(0,0,0.5)
Ti	(0,0,0)
S	(1/3, 2/3, z) (2/3, 1/3, -z) $z \approx 0.235$



(2) Ti と Li の配位数はいくらか.

(3) 最近接 Ti-S 距離を格子定数( $a, c$ )を用いて表せ.

4.  $\text{NaF}$  ( $a=4.614 \text{ \AA}$ ) と  $\text{MgO}$  ( $a=4.216 \text{ \AA}$ ) はともに NaCl 構造を持つ.  $\text{MgO}$  の格子エネルギーは  $\text{NaF}$  のそれの何倍か.