

1. 以下の問に答えよ。

(1) 以下の原子やイオンの電子配置を例にならって記せ。

例：ホウ素原子  $(1s)^2(2s)^2(2p)^1$

(ア)  $O^{2-}$ イオン  $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$

(イ) ケイ素原子  $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$

(ウ) カルシウム原子

$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^2$  または  $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^0(4s)^2$

(2) モリブデン原子の電子配置は $[Kr](4d)^4(5s)^2$ ではなく $[Kr](4d)^5(5s)^1$ となる。この理由を説明せよ。なお、 $[Kr]$ は希ガスの一つであるクリプトン原子の電子配置を略記したものである。

後者では、4d軌道にある5つの電子のスピンのすべてが同じ方向を向いている。その方がスピンの多重度が大きくなるため、フントの規則により後者が基底状態となる。

2. 以下の問に答えよ。

(1) 下記の化合物をイオン結合性の度合いが高い順に並べ替えよ。

NaF, Si, AlF<sub>3</sub>, AlN

NaF, AlF<sub>3</sub>, AlN, Si

(2) 下記の化合物のうち、NaClと同じマーデルング定数を持つものをすべて選べ。

CsCl, MgO, ZnS, KCl,  $\alpha$ -SiC

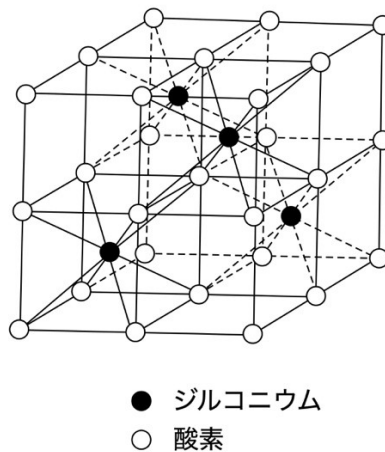
MgO と KCl

(3) アンモニア (NH<sub>3</sub>) 分子の窒素原子は sp<sup>3</sup> 混成軌道を形成するため、H-N-H 結合の角度は、正四面体の中心角と同じ 109.5° を取ると予測される。しかしながら、実際の結合角は 107.5° であり予測よりも小さい。この理由を説明せよ。

非共有電子対と共有電子対との間の反発の方が、共有電子対同士のそれよりも大きいため。

3.  $\text{ZrO}_2$ に関する以下の問に答えよ。

(1) 立方晶  $\text{ZrO}_2$ は下図に示すような萤石型構造を取る。単位格子中にジルコニウム原子と酸素原子はそれぞれ何個ずつ含まれているか。

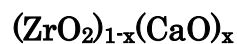


ジルコニウム原子 4 個，酸素原子 8 個

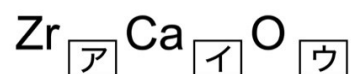
(2) 格子定数が  $0.520 \text{ nm}$  である場合，理論密度を有効数字 3 桁で求めよ。解答には単位を付すこと。ただし  $\text{Zr}=91.2$ ， $\text{O}=16.0$ ，アボガドロ数は  $6.02 \times 10^{23}$  とする。

$$\frac{91.2 \times \frac{4}{6.02 \times 10^{23}} + 16 \times \frac{8}{6.02 \times 10^{23}}}{(0.520 \times 10^{-7})^3} = 5.81 \text{ (g/cm}^3\text{)}$$

(3)  $\text{ZrO}_2$ の一部がモル比で  $x$  の割合で  $\text{CaO}$  に置き換わったとすると化学式は，



と表される。これを整理すると下記の化学式になる。



このとき，(ア) ~ (ウ) には何が入るか。数値あるいは  $x$  を用いた式で表せ。

(ア)  $1-x$ , (イ)  $x$ , (ウ)  $2-x$

(4) (3)の状態において格子間イオンは存在しないものと仮定すれば, どの原子のサイトに空孔が生じるか。

酸素原子