

物性化学Ⅰ 試験

1. バンドは、固体の電子構造を議論する上で基本となる概念である。原子軌道や分子軌道、さらには、巨大分子となるときの軌道の特徴から、固体においては分裂した電子準位の概念ではなくバンドが形成されるその機構について、概念図を示しつつ簡潔に説明せよ。

2. 固体における特徴的な物性に関する以下の問いに答えよ。

(1) 金属中の電子のエネルギー的挙動は、井戸型ポテンシャルによって考察することができる。この理由を論ぜよ。

(2) バンドにおける「状態密度」について、分子軌道におけるエネルギー準位との関係に触れながら説明せよ。

(3) 熱的励起状態について、金属中の電子と窒素などの分子では、大きな相違がある。どのように異なるのか、また、その理由について説明せよ。

3. イオン性の固体（イオン固体）の安定構造について議論したい。

(1) 二体(二つの分子やイオンを考える)の相互作用ポテンシャルについて、横軸に二体間の距離、縦軸にポテンシャル関数をとって、その概略図を示し、液体や気体、超臨界流体、さらに、結晶中で予測される粒子の位置について、理由を付して説明せよ。

(2) イオン固体では、ある中心イオン周囲の最近接イオンだけでなく、遠方のイオンの影響も無限級数として考慮することが重要である。これは何故か、クーロン相互作用によるポテンシャル関数の観点から説明せよ。

(3) 結晶全体で陰イオンと陽イオンが N 組あるときのエネルギー E_{Mad} は、マーデルング定数 A_M を用いて、以下のとおり表される。

$$E_{\text{Mad}} = -N \cdot \frac{A_M}{4\pi\epsilon_0 r} |Z_1 Z_2| e^2$$

ここで、 ϵ_0 は真空中の誘電率、 r は距離、 Z_i は電荷、 e は電気素量である。隣接イオンの近距離近接に由来する反発分を $E_{\text{rep}} = N \cdot B / r^n$ と ($n: 6 \sim 9$) とした場合、最安定構造における格子エネルギーの最小エネルギーを求め答えよ。

以上