

解答

問 1

(ア) Bohr (イ) 2 (ウ)  $-1/2$  (エ)  $m_e v = nh/2\pi$  (オ) 2 (カ)  $-1$  (キ) 4

(A)  $Z^2$  (B)  $\text{He}^+$

輝線の波数の比を考える。

$$\tilde{\nu}_{m \leftarrow n}^Z / \nu_{m' \leftarrow n'}^1 = Z^2 \left\{ \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right\} / \left\{ \frac{1}{m'^2} - \frac{1}{n'^2} \right\} = \left\{ \left( \frac{Z}{m} \right)^2 - \left( \frac{Z}{n} \right)^2 \right\} / \left\{ \frac{1}{m'^2} - \frac{1}{n'^2} \right\}$$

において、(a) (b)で  $\text{H}\alpha$ 線と  $\text{H}\beta$ 線が重なり、(b)では(a)の隣り合う二本の輝線の間に 1 本新たな輝線が含まれる特徴と上の関係式をにらむ。Hでは  $\text{H}\alpha$ 線は  $2 \leftarrow 3$   $\text{H}\beta$ 線は  $2 \leftarrow 4$ である。

$m'=2$  だからまず  $\text{He}^+$ の  $Z=2$  を考える。 $m=4$  とすると、 $\tilde{\nu}_{m \leftarrow n}^Z / \nu_{2 \leftarrow n'}^1 = \left\{ \left( \frac{2}{4} \right)^2 - \left( \frac{2}{n} \right)^2 \right\} / \left\{ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n'^2} \right\}$  で、

$n=6, 8, 10$  が H の  $n'=3, 4, 5$  の輝線と重なり、かつ  $n=5, 7, 9$  の輝線は H にはない。

$\text{Li}^{2+}$  ( $Z=3$ ) を考える。 $m=6$  とすると、 $\tilde{\nu}_{m \leftarrow n}^Z / \nu_{2 \leftarrow n'}^1 = \left\{ \left( \frac{3}{6} \right)^2 - \left( \frac{3}{n} \right)^2 \right\} / \left\{ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n'^2} \right\}$  で、

$n=9, 12, 15$  が H の  $n'=3, 4, 5$  の輝線と重なるが、 $n=7, 8, 10, 11, 13, 14$  の輝線は H にはない。つまりこの場合 (b)では(a)の隣り合う二本の輝線の間に 2 本新たな輝線が含まれることになるので、合致しない。 $Z$ を増やすと、(a)の隣り合う二本の輝線の間に現れる輝線の本数が増えるだけなので結局 (B)  $\text{He}^+$ と (キ)  $m=4$  が答えになる。

問 2

(1) 偏微分表示は全微分表示でも可とする。

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left( \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} \right) = E \psi(x, y) \quad \text{または、} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} \right) = E \psi(x, y)$$

$$(2) \text{ 波動関数 } \psi(x, y) = \left( \frac{2}{L} \right)^{1/2} \left( \frac{2}{M} \right)^{1/2} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{M} \quad (n_x, n_y = 1, 2, 3, 4, \dots)$$

$$\text{エネルギー} \quad E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2}{8m^2} \left( \frac{n_x^2}{L^2} + \frac{n_y^2}{M^2} \right)$$

$$(3) \text{ 座標 } \left( \frac{L}{4}, \frac{M}{2} \right), \left( \frac{3L}{4}, \frac{M}{2} \right) \quad \text{存在確率} \quad \frac{4}{LM}$$

(4)  $2\sqrt{2}$

問3

(ア) : 小さく (イ) : Z (ウ) : 1 (エ) : LCAO (オ) : 4 (カ) :  $\sigma_u 2p_z^*$  (キ) :  $\pi_u 2p_x, \pi_u 2p_y$

(ク) :  $B_2$

(ケ) : 58.43 nm の電磁波を eV 単位にすると、

$$\frac{(6.63 \times 10^{-34})(3.00 \times 10^8)}{(58.4 \times 10^{-9})(1.60 \times 10^{-19})} = 21.29 \text{ eV}$$

イオン化エネルギーは、 $21.29 - 9.18 = 12.11 \text{ eV}$  となる。

酸素分子のエネルギーは、 $-12.11 \text{ eV}$

(コ) : 短く

問4

I (1)  $236 \text{ kJ mol}^{-1}$  (2) 0.419 D (3) 5.45 %

II (ア) :  $sp^2$  (イ) :  $-\frac{1}{2}$  (ウ) :  $-\frac{\sqrt{3}}{2}$  (エ) :  $\sigma$  (オ) :  $\pi$  (カ) : 長 (キ) : 短 (ク) :  $\pi$

(ケ) : 非局在化