

慶應義塾大学理工学部 2018 年度春学期 化学A試験問題 試験時間:90 分

【必要なら次の定数および式を用いなさい。】プランク定数 $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ 、電子の質量 $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ 、電子の電荷の大きさ $e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$ 、光速 $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 、真空の誘電率 $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2\cdot\text{N}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ 、水素原子の軌道エネルギー $E(n) = -13.6/n^2 \text{ eV}$ (n : 主量子数)

問1 ボーア (Bohr) の原子モデルにおいて、原子番号 Z の水素様原子の軌道エネルギー $E(n)$ は、水素原子の位置エネルギーに含まれる核電荷が Z 倍されることに加えて、電子の軌道半径 r が

$$r = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{Z \pi m_e e^2}$$

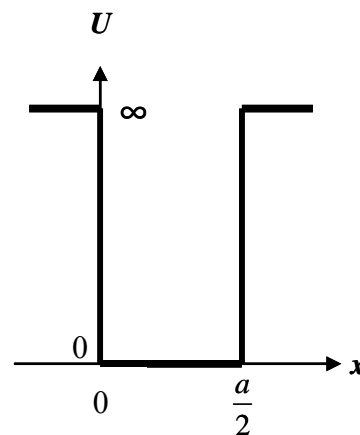
となることの両方に依存する。水素原子、ならびに水素様原子について、以下の各問いに答えなさい。

- (1) 水素原子からの発光のライマン (Lyman) 系列のうち、最も長波長の発光波長は 122 nm である。この発光の始状態と終状態の量子数 n をそれぞれ答えなさい。
- (2) (1)の波長 122 nm の光が、ホウ素 (B) の水素様原子からの発光にも観測された。この発光の始状態と終状態の量子数 n をそれぞれ答えなさい。
- (3) (1)の波長 122 nm の光を仕事関数 3.67 eV の固体表面に照射すると光電子が放出される。このとき最も大きな運動エネルギーの光電子について、その物質波の波長を、 nm 単位 (有効数字 3 桁) で答えなさい。
- (4) リチウム原子 (Li) の第3イオン化エネルギーは、 Li^{2+} で $n=1$ のエネルギー準位にある電子を $n=\infty$ のエネルギー準位に遷移させるために必要なエネルギーである。Li 原子の第3イオン化エネルギーの大きさを有効数字 3 桁で、 eV 単位で答えなさい。
- (5) 水素原子の $n=1$ の軌道半径 $r(\text{H}, n=1)$ と、ベリリウム原子 (Be) の水素様原子の $n=2$ の軌道半径 $r(\text{Be}, n=2)$ との比、 $r(\text{H}, n=1) / r(\text{Be}, n=2)$ 、の大きさを答えなさい。

問2 以下の文章を読み、(ア) ~ (ク) に、適切な語句、数値 (整数または有効数字 3 桁の値)、数式をそれぞれ入れなさい。

- (1) 右の図のように $0 \leq x \leq a/2$ の領域では、ポテンシャルエネルギーがゼロで、 $x < 0$ および $x > a/2$ ではポテンシャルエネルギーが無窮大である一次元の箱の中に粒子が存在する。この箱の境界では粒子の存在確率がゼロなので、 $x=0$ と $a/2$ では、波動関数の値がゼロでなければならない。 $0 \leq x \leq a/2$ の領域で $x=0$ と $a/2$ 以外の座標で波動関数の値がゼロになる場所は (ア) と呼ばれている。一次元の箱の中の質量 m の粒子の波動関数 $\Phi(x)$ は、エネルギー固有値 E に対して $E = \hbar^2 k^2 / (8\pi^2 m)$ の関係にある k を用いて、

$$\Phi(x) = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx \quad (C_1, C_2 \text{ は定数})$$



で表され、 $x=0$ と $a/2$ における境界条件を考慮すると、 k は量子数 $n (=1, 2, 3, \dots)$ を用いて $k =$ (イ) と表される。この領域における波動関数の形状をみると、量子数 n の増大に伴い (ア) の数が増え、その数は n を用いて表すと (ウ) となる。

- (2) 水素原子の波動関数 $\Psi_{n,l,m}$ は3つの量子数 n, l, m で規定される。スピンの自由度を除いて量子数がとれる範囲を考慮すると水素原子の M 殻に属する波動関数は全部で (エ) 個存在する。この波動関数 $\Psi_{n,l,m}$ は、式1のような動径 r 部分の波動関数 $R_{n,l}$ と角度部分 (極角 θ と方位角 ϕ) の波動関数 $Y_{l,m}$ の積で表され、ボーア半径を a_0 として、例えば水素原子の $1s, 2s$ 軌道の $R_{n,l}$ と $Y_{l,m}$ は、式2のように書ける。

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l} \cdot Y_{l,m} \quad (\text{式1})$$

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}, \quad R_{2,0} = \sqrt{\frac{1}{8}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}, \quad Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad (\text{式2})$$

動径分布関数を $D(r) = r^2 R_n^2$ とすると、半径 r と $r + dr$ の 2 つの球面間で電子を見出す確率は、 $D(r)dr$ で与えられる。水素原子の 1s 軌道の $D(r)$ が極大値を示す半径は、 $r = (\text{オ}) a_0$ となる。一方、2s 軌道は $r = (\text{カ}) a_0$ に (ア) をもつ。1s 軌道の $Y_{l,m}$ には、角度 θ と ϕ が含まれず、波動関数 $\Psi_{1,0,0}$ は角度に依存しない。これより、 $\Psi_{1,0,0}$ が同じ値をとる座標を結ぶと、 (キ) の形となる。原子核位置における $|\Psi_{n,l,m}|^2$ の値を比べると 1s 軌道は、2s 軌道の (ク) 倍である。

問3 以下の文章を読み、(ア) ~ (ク)、(コ) および (シ) には下記の【選択肢】の中から最も適切な語句、(ケ) には適切な数値、(サ) には有効数字 2 桁の数値を、それぞれ入れなさい。

- (1) ナトリウム原子 (Na: 原子番号 11) の最外殻の電子が占める軌道の名称は (ア) 軌道であり、この軌道を占める電子の個数は 1 個である。この電子が感じる他の電子による核電荷の遮蔽の大きさは、原子番号が一つ小さいネオン原子 (Ne) の最外殻の電子が感じるそれよりかなり (イ) い。これは、Ne 原子の最外殻の電子は他の多くの電子と同じ殻に分布するのに対し、Na 原子の最外殻の電子から見ると、他のすべての電子は自分より内側の殻に分布しているためである。その結果、Na 原子のイオン化エネルギーは Ne 原子のそれに比べてはるかに (ウ) くなる。一方、イオン化エネルギーと電子親和力の関係に注意すると、原子番号が Z の原子の (エ) と原子番号が $Z+1$ の原子の (オ) の間には、両原子の核電荷数は 1 だけ異なるものの、それぞれのエネルギー変化の前後の電子数と電子配置が同じ (ただし、変化の方向は逆) になる関係がある。このことを踏まえると、フッ素原子 (F) の (エ) は Ne 原子の (エ) よりかなり (カ) いことが推測される。
- (2) 酸素分子 (O_2) の電子構造について考える。 O_2 の 16 個の電子が占める軌道のうち最もエネルギーが高い軌道の名称は (キ) であり、この軌道を占める 2 個の電子のスピンのはきは (ク) である。 O_2 の結合次数は (ケ) であり、結合エネルギーは 5.2 eV になる。 O_2 のイオン化エネルギーは酸素原子 (O) のイオン化エネルギーより (コ) く、12.1 eV になる。 O_2 と O のイオン化エネルギーの差が 1.5 eV とすると、酸素分子正イオン (O_2^+) の結合エネルギーは (サ) eV となる。このことは O_2^+ の結合次数が O_2 の結合次数より (シ) くなることに対応している。

【選択肢】 $1s \cdot 2s \cdot 2p \cdot 3s \cdot 3p \cdot \sigma_g 2p \cdot \sigma_u^* 2p \cdot \pi_u 2p \cdot \pi_g^* 2p$ ・ 大き ・ 小 ・ イオン化エネルギー ・ 電子親和力 ・ 同じ ・ 反対

問4 以下の文章を読み、(ア)、(エ)、(カ)、(シ) には有効数字 3 桁の数値、(イ)、(ウ)、(オ)、(キ)、(ク) には下記の【選択肢】の中から最も適切な語句、(ケ) ~ (サ) には適切な数値をそれぞれ入れなさい。ただし、イオン化エネルギーは Li: 5.39 eV および Cl: 13.0 eV、電子親和力は Li: 0.620 eV および Cl: 3.61 eV とする。また、正負の電荷 $\pm e$ が 1 Å 離れたときの双極子モーメントの大きさを 4.80 D とする。

- (1) 塩化リチウム分子 (LiCl) の結合性について考える。まず、Li と Cl の原子間の核間距離 (r) が無限遠 ($r = \infty$) のとき、イオン (対) 状態 $[\text{Li}^+ + \text{Cl}^-]$ のエネルギーは中性状態 $[\text{Li} + \text{Cl}]$ と比べて (ア) J だけ (イ) 。中性状態の 2 つの原子を $r = \infty$ から近づけていくと、イオン (対) 状態になった場合の (ウ) 引力による安定化が大きくなる。原子間の距離が (エ) Å より小さくなると (オ) 移動が進行し、イオン結合性が増大する。LiCl 分子の平衡核間距離 r_e は 2.02 Å であり、このときの双極子モーメントが 7.13 D とすると、LiCl 分子のイオン結合性は (カ) % となる。さらに、核間距離 r を平衡核間距離 r_e より小さくすると (キ) による強い交換反発力が働く。
- (2) $\text{H}-(\text{CH}=\text{CH})_{10}-\text{H}$ は、炭素原子が (ク) 混成をとり、計 (ケ) 個の π 電子をもつ鎖状のポリエンである。この π 電子は、鎖状の分子内を自由に運動する一次元の箱の中の自由粒子として考えることができる。一次元の箱の長さが L の場合の軌道準位のエネルギー表式は $E_n = n^2 h^2 / (8m_e L^2)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) で与えられるものとする。このとき、このポリエンの HOMO に対応する量子数 n は (コ) 、LUMO に対応する量子数 n は (サ) である。また、このポリエンの光吸収測定で最も長波長に位置する吸収波長が 400 nm であるとする、このポリエンの分子長 (箱の長さ) は (シ) nm となる。

【選択肢】 高い、同程度である、低い、水素、クーロン、分子内、共有、配位、エネルギー、フントの規則、パウリの排他原理、ボーアの理論、イオン化エネルギー、電子親和力、分子間、電子、プロトン、光電効果、電気陰性度、 sp^3 、 sp^2 、 sp 、ド・ブロイ式、黒体輻射、 π 、 σ

問 1

(1) 始状態の量子数 n : 2、 終状態の量子数 n : 1

ライマン系列は(真空)紫外光領域の発光における系列であり、終状態の量子数 n は 1 である。水素の軌道エネルギー $E(n)$ が $E(n) = -13.6/n^2$ として表されることから、122 nm の発光波長に対応する始状態の量子数 n は以下の式から求まる。

$$-13.6 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{1^2} \right) = \frac{hc}{e \times 122 \times 10^{-9}}$$

ここで、波長 122 nm を eV 単位に変換している。この式から始状態の量子数は $n = 2$ と求まる。

(2) 始状態の量子数 n : 10、 終状態の量子数 n : 5

問題の冒頭で与えられている水素原子の軌道エネルギー $E(n) = -13.6/n^2$ であることをもとに、水素様原子の軌道エネルギーを考えると、 $E(n) = -13.6 Z^2/n^2$ であることがわかる。ホウ素(B)の原子番号は 5 であり、ホウ素の水素様原子は B^{4+} である。また、122 nm の発光は(1)で求めたように、水素原子の量子数 1 と 2 における軌道エネルギーの差に対応する。そのエネルギーは

$$-13.6 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right)$$

である。したがって、ホウ素の原子番号 $Z = 5$ を用いて、上式を変形すると以下ようになる。

$$\begin{aligned} & -13.6 \times 5^2 \left(\frac{1}{2^2 \times 5^2} - \frac{1}{1^2 \times 5^2} \right) \\ & = -13.6 \times 5^2 \left(\frac{1}{10^2} - \frac{1}{5^2} \right) \end{aligned}$$

この式は B^{4+} の量子数 5 と 10 における軌道エネルギーの差を意味している。従って、 B^{4+} における 122 nm の発光は量子数が 10 の状態から 5 の状態への遷移に由来することがわかる。

(3) 0.482 nm

122 nm の光は eV 単位で

$$\frac{hc}{e \times 122 \times 10^{-9}} = 10.16 \text{ eV}$$

のエネルギーをもつ。この光を仕事関数 3.67 eV の固体表面に照射した際に放射される光電子のもつ最大の運動エネルギーは $10.16 - 3.67 = 6.49 \text{ eV}$ である。光電子の運動量 p は運動エネルギーが $\frac{p^2}{2m_e}$ と表されることを用いて、

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m_e} &= 6.49 \times e \text{ (J)} \\ \therefore p &= \sqrt{2m_e \times 6.49 \times e} \end{aligned}$$

として J 単位で p が求まる。ド・ブロイの式 $\lambda = \frac{h}{p}$ を用いて、物質波の波長 λ は以下のように求まる。

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e \times 6.49 \times e}}$$

$$= 0.482 \times 10^{-9} \text{ (m)}$$

$$= 0.482 \text{ (nm)}$$

(4) 122 eV

Li^{2+} は $Z=3$ の水素様原子であるため、軌道エネルギーは量子数 n を用いて $-13.6 \times 3^2/n^2$ (eV) と表される((2)参照)。 $n = \infty$ の準位の軌道エネルギーは

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (-13.6 \times 3^2/n^2) = 0$$

であるため、求める第3イオン化エネルギーは

$$0 - \left(-\frac{13.6 \times 3^2}{1^2} \right) = 122 \text{ eV}$$

と求まる。

(5) 1

軌道半径の式は $r = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{Z \pi m_e e^2}$ から明らかなように Z と n にのみ依存する。従って、 $\frac{n^2}{Z}$ の因子に着目すれば

よい。この $\frac{n^2}{Z}$ の因子は、水素原子($Z=1$)の $n=1$ の軌道半径においては $\frac{n^2}{Z} = \frac{1^2}{1} = 1$ であり、ベリリウム原

子($Z=4$)の $n=2$ の軌道半径においても $\frac{n^2}{Z} = \frac{2^2}{4} = 1$ である。従って、求める軌道半径の比は1である。

問2

(1) (ア)節 (イ) $\frac{2n\pi}{a}$ (ウ) $n-1$

(2) (エ)9 (オ)1 (カ)2 (キ)球 (ク)8

[解説]

(1)

(ア) 波動関数の値が0をよぎる位置を「節(ふし)」と呼ぶ。

(イ) $x=0$ のとき、 $\sin 0 = 0$, $\cos 0 = 1$ であることから、 $\Phi(0) = C_2$ である。境界条件から、 $\Phi(0) = 0$ であるため、 $C_2 = 0$ となる。

$x=a/2$ のとき、 $\Phi(a/2) = C_1 \sin \frac{ka}{2}$ である。境界条件より、 $\Phi(a/2) = 0$ であるが、 $C_1 = 0$ とすると、波動関数が全領域にわたって0となるため不適である。従って、 $\Phi(a/2) = 0$ を満たすためには $\sin \frac{ka}{2} = 0$ となる必要がある。 n を自然数とすると $\sin n\pi = 0$ であるため、 $\frac{ka}{2} = n\pi$ と表すことができ、 k について解くと $k = \frac{2n\pi}{a}$ となる。

(ウ) $\Phi(x) = C_1 \sin \frac{2n\pi}{a} x$ が0となる x は、両端($x=0, a/2$)を除くと

$$x = \frac{a}{2n} \times 1, \quad \frac{a}{2n} \times 2, \quad \frac{a}{2n} \times 3, \dots, \frac{a}{2n} \times (n-1)$$

であり、 $n-1$ 個ある。従って、節の数は $n-1$ である。

(2)

(エ) M殻は主量子数 $n=3$ に対応する。方位量子数 l は $0, 1, 2, \dots, n-1$ のいずれかの値をとることができる

る。従って $n=3$ での l のとり得る値は $0, 1, 2$ である。磁気量子数 m は $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ のいずれかの値をとることができる。以上のことから、 $n=3$ において (l, m) がとり得る組み合わせを列挙すると以下のようになる。

$$(l, m) = (0, 0)$$

$$(1, 0), (1, 1), (1, -1)$$

$$(2, 0), (2, 1), (2, -1), (2, 2), (2, -2)$$

よって、9 個存在する。

(オ) 1s 軌道は $n=1, l=0$ に対応するため、動径分布関数 $D(r)$ は以下のように表される。

$$\begin{aligned} D(r) &= r^2 R_{1,0}^2 \\ &= r^2 \times 2^2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{2 \times \frac{3}{2}} e^{-2 \times \frac{r}{a_0}} \\ &= 4r^2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} \end{aligned}$$

極大値を求めるために $D(r)$ を微分すると以下のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{dD(r)}{dr} &= 8r \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} - 8r^2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} \\ &= 8r \left(\frac{1}{a_0} \right)^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} \times (a_0 - r) \end{aligned}$$

従って、 $r = a_0$ において $\frac{dD(r)}{dr} = 0$ となる。 $\frac{dD(r)}{dr}$ は $r < a_0$ では正、 $r > a_0$ では負となるため $D(r)$ は $r = a_0$ で極大となる。

(カ) 2s 軌道では $n=2, l=0$ であるため、波動関数は

$$\begin{aligned} \Psi_{2,0,0} &= R_{2,0} \cdot Y_{0,0} \\ &= \sqrt{\frac{1}{8}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \end{aligned}$$

で与えられる。 $r = 2a_0$ のとき、波動関数の値が 0、すなわち節となる。

(キ) 角度 θ, ϕ に依存しないことから、 $\Psi_{1,0,0}$ は中心からの距離 r にのみ依存する。すなわち中心からの距離が同じであれば、 $\Psi_{1,0,0}$ は同じ値をとるため、それらの座標を結ぶと球の形になる。

(ク) 原子核位置とは $r=0$ のことである。従って、 $r=0$ における $|\Psi_{2,0,0}|^2$ に対する $|\Psi_{1,0,0}|^2$ の比を求めればよい。

$$\frac{|\Psi_{1,0,0}|^2}{|\Psi_{2,0,0}|^2} = \frac{4 \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} \frac{1}{4\pi}}{\frac{1}{8} \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 \left(2 - \frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{1}{4\pi}}$$

$r=0$ を代入すると、 $\frac{|\Psi_{1,0,0}|^2}{|\Psi_{2,0,0}|^2} = 8$ と求まる。

問 3

(1)

(ア) **3s** : ナトリウムの電子配置は $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

(イ) **大き** : 核電荷の大きさではなく遮蔽の大きさを答えることに注意する。

(ウ) **小さ** : 感じる遮蔽の大きさが大きいということは電子を取り去りやすい、つまりはイオン化エネルギーが小さいということになる。

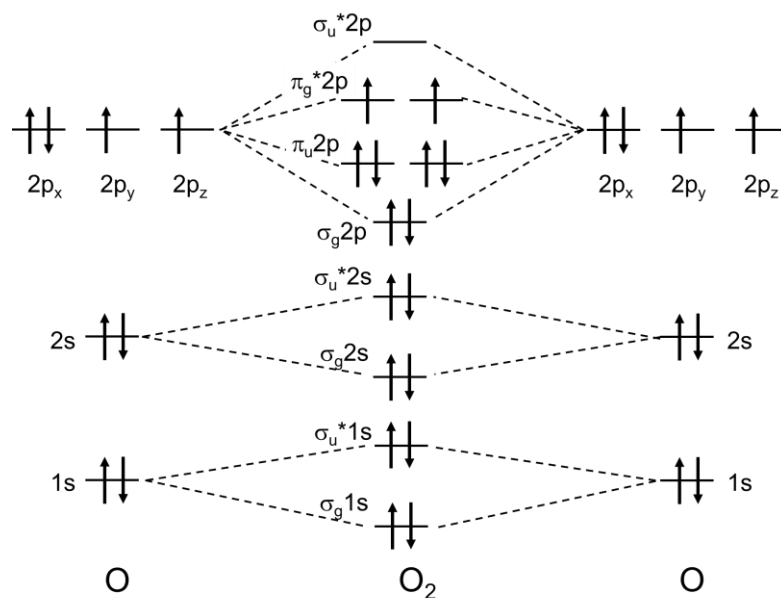
(エ) **電子親和力** : 電子親和力は 1 価の陰イオンになるときに放出されるエネルギーのこと。つまり、エネルギー変化の前後で電子数が 1 個増加し、原子番号 $Z+1$ の原子の電子数と一致する。

(オ) **イオン化エネルギー** : (エ) と逆に考えればよい。

(カ) **大き** : (ウ) で考えたように Ne 原子のイオン化エネルギーは大きい。イオン化エネルギーが大きいということは Ne 原子が安定な電子配置であることを示す。つまり F 原子の電子数が 1 個増加することによる安定化のエネルギー (電子親和力) は大きいといえる。

(2)

(キ) **$\pi_g^* 2p$** : 下図のように考える。



(ク) **同じ** : フントの規則に従えば、同じエネルギーをもった縮退した軌道があるとき、それぞれの軌道に平行な向きのスピんで 1 電子ずつ収容されることがわかる。

(ケ) **2** : $\{(\text{結合性軌道の電子数}) - (\text{反結合性軌道の電子数})\} \div 2$ をすればよい。

(コ) **小さ** : $\pi_g^* 2p$ 軌道のエネルギーレベルは O 原子の 2p 軌道のそれよりも高い (上図参照)。よって電子を取り去るために必要なエネルギーは O_2 分子の方が小さい。

(サ) **6.7** : 結合エネルギーはその結合を切るために必要なエネルギーを指し、この問いでは、 $(2 \text{ つの O 原子のもつエネルギー}) - (O_2 \text{ 分子のもつエネルギー}) = 5.2 \text{ eV}$ が成り立つ。また、(コ) より、O 原子のイオン化エネルギーは $12.1 + 1.5 = 13.6 \text{ eV}$ になることに注意する。したがって、 O_2^+ イオンの結合エネルギーを算出するには、 $(O \text{ 原子と } O^+ \text{ イオンのもつエネルギー}) - (O_2^+ \text{ イオンのもつエネルギー})$ を求めればよく、これは、 $\{2 \text{ つの O 原子のもつエネルギー} + 13.6 \text{ (O 原子のイオン化エネルギー)}\} - \{(O_2 \text{ 分子のもつエネルギー}) + 12.1 \text{ (} O_2 \text{ 分子のイオン化エネルギー)}\}$ で与えられる。すなわち、 $5.2 + 13.6 - 12.1 = 6.7 \text{ eV}$

(シ) **大き** : O_2 分子から電子を 1 つ取り去った場合に対して (ケ) と同様に考えればよい。反結合性軌道から電子が抜けるので、結合次数は大きくなる。結合エネルギーが大きくなることにも対応している。

問 4

(1)

(ア) 2.85×10^{-19} : (イ) と合わせて解説する。

(イ) 高い : Li 原子から電子を 1 つ取り去るために必要なエネルギーが 5.39 eV で Cl 原子に電子を 1 つ加えた時の安定化エネルギーが 3.61 eV であるから、 $5.39 - 3.61 = 1.78$ eV だけエネルギーが高くなっている。ジュール(J)単位に変換して、 $1.76 \times 1.60 \times 10^{-19} = 2.85 \times 10^{-19}$ J

(ウ) クーロン : 符号の異なる二つの荷電粒子間に働く引力のこと。

(エ) 8.08 : クーロン引力による安定化の項が (ア) で求めた不安定化の項を打ち消せる距離を求めればよい。よって、下の式のように求められる。(Å 単位で答えることに注意する。)

$$e^2/(4\pi\epsilon_0 r_c) = 2.85 \times 10^{-19} \quad r_c = \underline{0.808 \text{ nm}}$$

(オ) 電子 : (エ) で求めた r よりも核間距離が小さくなることで、クーロン引力による安定化の項のほうが大きくなることから電子移動が起きてイオン対になる。

(カ) 73.5 : イオン結合性が 100% の場合であれば双極子モーメントは $2.02 (\text{\AA}) \times 4.80 (\text{D}) = 9.70 (\text{D})$ になる。ここで、 $7.13 (\text{D}) / 9.70 (\text{D}) \times 100$ を計算すれば答えを導くことができる。

(キ) パウリの排他原理 : パウリの排他原理では、「1 つの軌道には上向き、下向きスピンの電子が 1 個ずつ入ることができる」。したがって、核間距離が小さくなると、相手原子の被占有軌道を避けるように電子の運動が制限され、相対的に軌道が不安定化する。

(2)

(ク) sp^2

(ケ) 20 : ポリエン中で sp^2 混成した炭素数が 20 であるため、 π 電子の数も 20 となる。

(コ) 10 : 下の軌道から順に 2 個ずつ電子を詰めていくと、10 番目が HOMO になる。

(サ) 11 : (コ) と同様に考える。

(シ) 1.60 : 問題文中に与えられているエネルギー表式を使う。

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2}$$

ここでは HOMO ($n=10$) から LUMO ($n=11$) への遷移を考えればよい。

$$\frac{11^2 h^2}{8m_e L^2} - \frac{10^2 h^2}{8m_e L^2} = 4.97 \times 10^{-19} (\text{J})$$

ここで、右辺は 400 (nm) を J 単位に変換したものである ($hc/\lambda = 4.97 \times 10^{-19} (\text{J})$)。

これを、 L について解けば答えが得られる。nm 単位で解答することに注意する。