東京大学大学院
新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻

受験番号					

問題冊子にも受験番号を書きなさい.

平成 24 年度大学院入学試験問題

修士課程

専門基礎科目

平成 23 年 8 月 23 日（火）

13:30～16:00（150 分）

注意事項

1. 試験開始の合図があるまで，この冊子を開いてはいけません.
2. 本冊子の総ページ数は 18 ページです．落丁，乱丁，印刷不鮮明な箇所などがあった場合には申し出ること.
3. 解答には，必ず黒色鉛筆（または黒色シャープペンシル）を使用しなさい.
4. 問題は，数学　4 問，物理学　4 問，化学　3 問、合計 11 問出題されます．そのうち 3 問を選択して解答しなさい．解答する 3 問は，1 科目の中からでもよいし，複数科目から選択して解答してもよい.
5. 解答用紙は計 3 枚配られます．　各問題ごとに必ず 1 枚の解答用紙を使用しなさい．解答用紙に書ききれない場合は，裏面にわたってもよい.
6. 解答は日本語または英語で記入しなさい.
7. 解答用紙上方の指定された箇所に，受験番号およびその用紙で解答する問題番号を忘れずに記入しなさい．問題冊子にも受験番号を記入しなさい.
8. 草稿用紙は本冊子から切り離さないこと.
9. 解答に関係ない記号，符号などを記入した答案は無効とする.
10. 解答用紙・問題冊子は持ち帰ってはいけません.

（草稿用紙）

(草稿用紙)

（草稿用紙）

第１問（数学）

(問 1) $f(x) = x - \sin x$ とする．実数 $x \geq 0$ に対して，

$$f(x) \geq 0$$

であることを証明せよ．

(問 2) 実数 $x \geq 0$ に対して，以下の 4 つの不等式が成り立つことを証明せよ．

$$\begin{aligned} 1 - \frac{x^2}{2} &\leq \cos x & (1) \\ x - \frac{x^3}{6} &\leq \sin x & (2) \\ \cos x &\leq 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} & (3) \\ \sin x &\leq x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} & (4) \end{aligned}$$

(問 3) $\sin \frac{1}{10}$ の小数点以下上位 6 桁の値を求めよ．

(問 4) $\cos\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{\sqrt{3}}{2}$ を用いて，

$$2 - \sqrt{3} \leq \left(\frac{\pi}{6}\right)^2 \leq 6 - 2\sqrt{3}\sqrt{1+\sqrt{3}}$$

であることを証明せよ．

【注意】：(問 2) が解けていなくても，(問 3)，(問 4) を解く際に，不等式 (1)–(4) を用いて良い．

第２問（数学）

$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$ を３次元実ベクトルとする．また２次元ベクトル $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$ が，$\boldsymbol{u}$ を用いて $\boldsymbol{x} = A\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{z} = C\boldsymbol{u}$ と表現できるものとする．ここで行列 A, B, C は次式で定義されている．

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 2 \end{pmatrix} \qquad C = \begin{pmatrix} 4 & 2 & -5 \\ 7 & 2 & -14 \end{pmatrix}$$

以下の問に答えよ．

(問1) $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ 9 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 13 \\ 2 \end{pmatrix}$ のとき，$\boldsymbol{u}$ の値を求めよ．

(問2) 任意の $\boldsymbol{u}$ に対して $\boldsymbol{z} = H\boldsymbol{y}$ を満たす行列 H を求めよ．また，その行列 H の固有値と固有ベクトルを求めよ．

(問3) 任意の $\boldsymbol{u}$ に対して $\boldsymbol{z} = G\boldsymbol{x}$ を満たす行列 G は存在しないことを証明せよ．

(問4) (問2) で求めた行列 H に対して $\boldsymbol{z}_n = H^n \boldsymbol{y}_0$ とし，$\boldsymbol{z}_n = \begin{pmatrix} z_{1n} \\ z_{2n} \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y}_0 = \begin{pmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{pmatrix}$ とする．

(a) $y_{10} = y_{20}$ のとき，$\lim_{n\to\infty} \boldsymbol{z}_n$ を求めよ．

(b) $y_{10} \neq y_{20}$ のとき，$\lim_{n\to\infty} \dfrac{z_{1n}}{z_{2n}}$ を求めよ．

第3問（数学）

関数 $f(x)$ とそのフーリエ変換 $F(k)$ は以下の式で定義される関係にある．

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k$$

ここで i は虚数単位であり，e は自然対数の底である．以下の問に答えよ．

（問1）$f(x) = \mathrm{e}^{-ax^2}$ とし，$a > 0$ とする．

(a) $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x$ を求めよ．ここで $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$ の関係を用いてよい．

(b) $f(x)$ のフーリエ変換 $F(k)$ を求めよ．

(c) $\int_{-\infty}^{\infty} (f(x))^2\mathrm{d}x$ と $\int_{-\infty}^{\infty} (F(k))^2\mathrm{d}k$ を求め，これら二つの定積分の関係を述べよ．

（問2）これ以降 $f(x)$ を微分可能な任意の関数で，式 (1) のように規格化されているものとする．

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2\mathrm{d}x = 1 \tag{1}$$

ここで複素数 z に対して，$\overline{z}$ は複素共役を表し，$|z| = \sqrt{z\overline{z}}$ は z の絶対値を表す．

(a) $\int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2\mathrm{d}k$ を求めよ．ここでデルタ関数 $\delta(x)$ は式 (2) で与えられる事を用いても良い．

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{2}$$

(b) 式 (3) を証明せよ．ここで式 (2) を用いても良い．ただし $f'(x)$ は $f'(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)$ で定義される．

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f'(x)|^2\mathrm{d}x = 4\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} k^2|F(k)|^2\mathrm{d}k \tag{3}$$

(c) $f(x)$ が

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}|f(x)|^2\mathrm{d}x = -1 \tag{4}$$

を満たすとき，式 (5) を証明せよ．

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} x^2|f(x)|^2\mathrm{d}x\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} k^2|F(k)|^2\mathrm{d}k\right) \geq \frac{1}{16\pi^2} \tag{5}$$

【注意】必要であれば式 (6) の不等式を用いて良い．ここで $g(x)$ と $h(x)$ は2乗可積分関数である．

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^2\mathrm{d}x\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} |h(x)|^2\mathrm{d}x\right) \geq \left|\int_{-\infty}^{\infty} g(x)\overline{h(x)}\mathrm{d}x\right|^2 \tag{6}$$

第４問 (数学)

ある粒子が，時刻 $t=0$ のとき $x=0$ にあるものとする．そして，時刻 t が１進むごとに x 軸上を確率 p で $+1$，確率 $(1-p)$ で -1 移動することとする．ただし，$0<p<1$ である．以下の問に答えよ．

(問１) この粒子が，時刻 $t=2$ のときに $x=0$ にある確率を求めよ．

(問２) この粒子が，時刻 $t=2m$ のときに $x=0$ にある確率 $\alpha(m)$ を考える．ただし m を非負整数とする．

(a) この粒子の動きを，図１のように (t,x) 平面に経路として描くことにする．このとき，(t,x) 平面における座標 $(0,0)$ から $(2m,0)$ への経路の個数を求めよ．

(b) $\alpha(m)$ を求めよ．

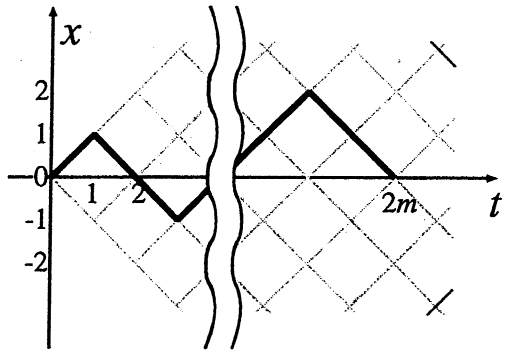


図１

(問３) 再度この粒子の動きを (t,x) 平面に経路として描くことにする．

(a) (t,x) 平面における座標 $(1,1)$ から $(2m-1,1)$ への経路の個数を求めよ．

(b) (t,x) 平面における座標 $(1,-1)$ から $(2m-1,1)$ への経路の個数を求めよ．

(c) (t,x) 平面における座標 $(1,1)$ から $(2m-1,1)$ への経路のうち，$x=0$ を経由する経路の個数は，(問３)(b) で求めた $(1,-1)$ から $(2m-1,1)$ への経路の個数と等しくなることを説明せよ．

(d) (t,x) 平面における座標 $(0,0)$ から $(2m,0)$ への経路のうち，途中で $x=0$ を経由しない経路の個数を求めよ．

(問４) この粒子が，時刻 $t=2m$ のときにはじめて $x=0$ に戻ってくる確率を $\beta(m)$ とする．ただし，m を正の整数とする．

(a) $\beta(m)$ を求めよ．

(b) $\beta(m)=4p(1-p)\alpha(m-1)-\alpha(m)$ が成り立つことを証明せよ．

第５問（物理学）

図１のように，$y=\dfrac{a}{2}x^2-\log x$，$x>0$ で表される曲線に沿って滑らかに移動できる質点（質量 m）を考える．重力は y 軸の負の向きに働き，重力加速度を g とする．また，a は正の定数である．

（問１）　質点の運動方程式 $m\dfrac{d^2x}{dt^2}=f_0(x)$ を導出せよ．

（問２）　質点の持つ位置エネルギーが最小となる位置を求め，その近傍で $f_0(x)$ を x の一次式で近似せよ．

（問３）　（問２）の結果を用いて，位置エネルギーが最小となる位置の近傍で質点を微小振動させたときの周期 T_0 を求めよ．

次に，図２のように曲線を y 軸の周りに一定の角周波数 ω で回転させた状態について，回転座標系を用いて考える．ただし，ω は $0<\omega<\sqrt{ag}$ の条件を満たす．

（問４）　質点の運動方程式 $m\dfrac{d^2x}{dt^2}=f_1(x)$ を導出し，質点が曲線上で静止する釣り合いの位置を求めよ．

（問５）　釣り合いの位置の近傍で質点を微小振動させたときの周期 T_1 を求め，T_0 との大小関係を述べよ．

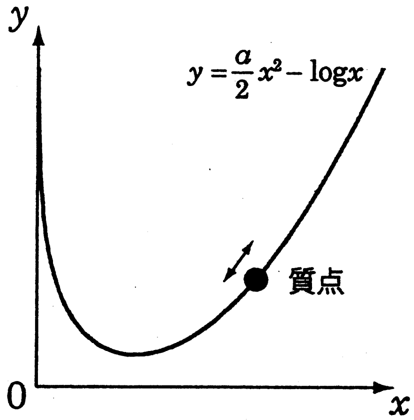


図１

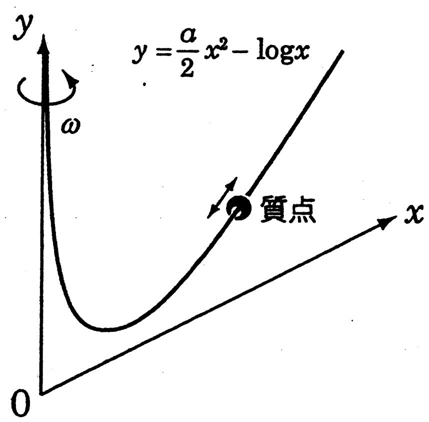


図２

第６問（物理学）

内半径 a，外半径 a' の導体球殻があり，初期電荷は零，真空の誘電率を ε_0 とする．

（問１）図１のようにスイッチ S を開いた状態で点電荷 q が導体球殻の中心にある時，導体球殻内外の表面の電荷密度を求めよ．また，導体球殻を含む全領域の径方向電界及び電位の径方向分布を求め，図示せよ．

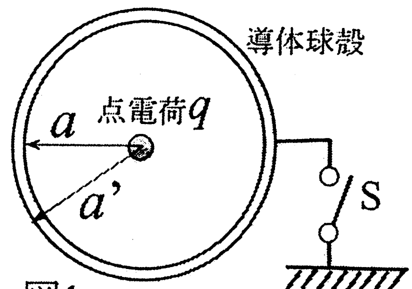


図1

（問２）次にスイッチ S を閉じて導体球殻をアースした．電荷 q を図２のように距離 b だけ動かした時（$b<a$），導体球殻内側表面の電荷密度（絶対値）の最大値を求めよ．

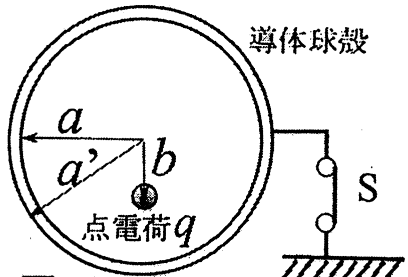


図2

（問３）今度は図３のように中心に半径 b の導体球を設置する（$b<a$）．導体球殻をアースし，導体球に電位 V を与えるとする．導体球表面の電荷密度を求め，導体球殻を含む全領域の電界（径方向）の径方向分布を図示せよ．

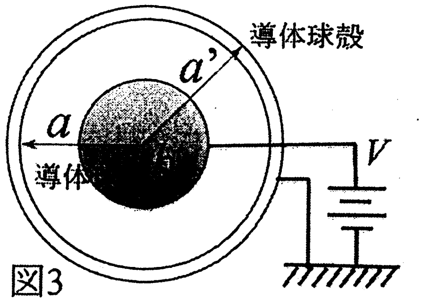


図3

（問４）（問３）の時，導体球と導体球殻の間を抵抗率 k の抵抗体で満たす時，導体球と導体球殻の間を流れる電流と導体球殻を含む全領域の電界（径方向）を求めよ．

（問５）図４のように導体球をアースし，導体球殻に電位 V を与える．導体球殻の全電荷を求め，導体球殻を含む全領域の電界（径方向）の径方向分布を図示せよ．

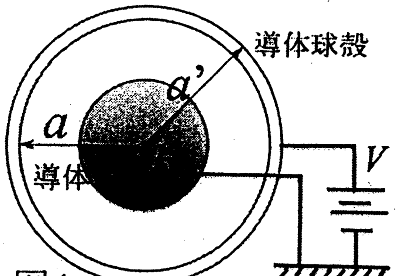


図4

第７問（物理学）

気体が理想気体の状態方程式に従って状態変化し，気体の物性値は状態によらず一定であるとして，以下の問に答えよ．ただし，γ: 比熱比，P : 圧力，V: 体積，T: 温度，S: エントロピー，とする．

（問１）以下に示すマクスウェルの関係式を用いて，気体が等エントロピー変化する際に，$P \cdot V^{\gamma}$ が一定に保たれることを示せ．

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$$

次に，下図のような周囲大気に対して吸排気するガスタービン（ブレイトンサイクル）を考える．すなわち理想的な場合には，状態①から②は等エントロピー圧縮，状態②から③は等圧加熱，状態③から④は等エントロピー膨張とする．ここで，

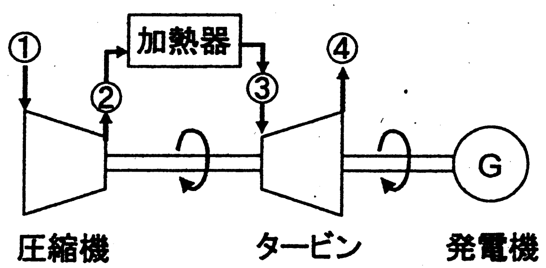
圧力比：π （ $= P_2 / P_1$ ）

温度比：τ （ $= T_3 / T_1$ ）

圧縮機断熱効率：$\eta_C = \dfrac{\text{等エントロピー圧縮に要する仕事}}{\text{圧縮機が実際に要する仕事}}$

タービン断熱効率：$\eta_T = \dfrac{\text{タービンから実際に得られる仕事}}{\text{等エントロピー膨張で得られる仕事}}$

とする．なお，添字１，２，３，・・・は，状態①，②，③，・・・での値とする．また，圧縮及び膨張の過程においては，直接外部との熱のやり取りは無いものとする．



（問２）理想的なサイクル（$\eta_C=\eta_T=1$）の T(温度)－S(エントロピー)線図を描き，①～④に対応する点を示せ．また，この理想サイクルの熱効率を，π と γ を用いて，導出の過程も含めて示せ．

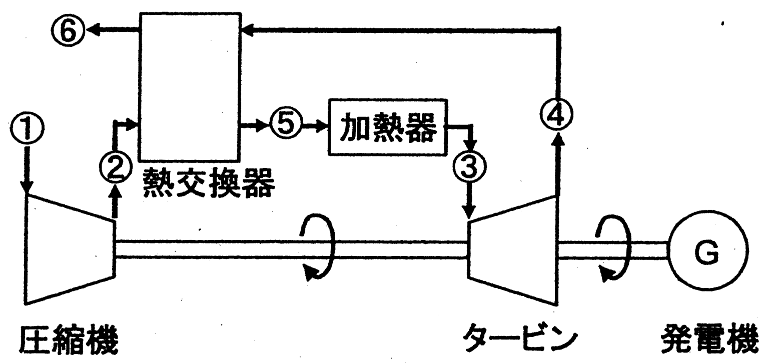
（問３）損失のある実際のサイクル（η_C<1, η_T<1）が，理想サイクルに比べてどのようになるかを T－S 線図を用いて説明し，サイクルの熱効率を γ，τ，π，η_C，

η_Tを用いて求めよ．ただし、実際のサイクルにおいてもπ，τは理想サイクルの値が保たれるものとし，加熱器内の圧力損失は無視できるものとする．

（問４）（問３）で想定した損失のある圧縮及び膨張過程は，ポリトロープ変化（$P \cdot V^n$＝一定，n：ポリトロープ指数）と考えることができる．①→②の圧縮過程について，エントロピー増分を定積比熱C_v，n，γ，πを用いて求めよ．

（問５）下図のように，タービン排熱を回収する熱再生サイクルによって得られる効果を，$T-S$線図を用いて説明せよ．なお，熱交換器内部の圧力損失は無視できるものとしてよい．また，理想サイクル（$\eta_C=\eta_T=1$）の場合の熱効率を，γ，π，τ，η_Rを用いて求めよ．ただし，η_Rは熱交換器の温度効率とし，以下のように定義されるとする．

$$\eta_R = \frac{T_5 - T_2}{T_4 - T_2}$$



第８問（物理学）

$V(x)=\dfrac{1}{2}kx^2$ というポテンシャル中で x 方向に１次元運動する質量 m の粒子を考える．但し k は正の定数であり，プランク定数を 2π で割ったものを $\hbar$ として以下の問いに答えよ．

（問１）粒子の全エネルギーを W，波動関数を $\psi(x)$ とするとき，定常状態を表すシュレディンガー方程式を書け．

（問２）$\xi=\sqrt{m\omega_c/\hbar}\,x$（但し $\omega_c=\sqrt{k/m}$）と変数変換し，$\psi(x)=e^{-\xi^2/2}u(\xi)$ とおくとシュレディンガー方程式はどう書き直されるか？

（問３）一般に微分方程式

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{du(\xi)}{d\xi}+2nu(\xi)=0$$

の解 $u(\xi)$ は n が非負の整数の場合，n 次のエルミート多項式となり，それに対応する波動関数 $\psi(x)=e^{-\xi^2/2}u(\xi)$ はポテンシャルに束縛された状態を表すが，それ以外の場合は無限遠で発散する．この事実を用い，ポテンシャル $V(x)=\dfrac{1}{2}kx^2$ に束縛された粒子のエネルギーが取り得る値（固有値）を求めよ．（途中経過も示すこと．）

（問４）この粒子の全エネルギーは一番低い状態でも有限である．その理由を 50 字程度で説明せよ（定性的でよい）．

（問５）この粒子が電荷 q を持っており，x 方向に一様な電場 E を加えたとする．このときのシュレディンガー方程式を書け．エネルギー固有値を（問３）の場合と比較することにより，エネルギーの変化分を導出せよ．

第９問（化学）

溶液についての以下の問に答えよ．解答に際しては，導出の手順も示すこと．

（問１）溶液中の溶質の分子量は，浸透圧や蒸気圧降下の計測に基づいて推定できる．以下の設問に答えよ．

(1) ベンゼン 780 g 中に未知の不揮発性の分子性化合物 A を 50 g 溶かした溶液の蒸気圧は，大気圧下でのベンゼンの沸点である 80 ℃において 988 hPa であった．A の分子量を求めよ．ただし，炭素と水素の原子量は，それぞれ 12 および 1 とする．

(2) 水 1.0 L 中に化学式 Na_2X で表される強電解質塩を 57 mg 溶かした水溶液は，27 ℃において 30 hPa の浸透圧を示した．X は水溶液中で 2 価のイオンとなっているとして，X の化学式量を求めよ．ただし，Na の原子量は 23 とする．

（問２）一般に，化学反応や相変化においてギブズ・ヘルムホルツの式が成り立つことが知られている．この式を用いると溶液の沸点上昇と溶質濃度の関係を求めることができる．以下の設問に従ってギブズ・ヘルムホルツの式を導け．ただし T, P, S, V は，それぞれ温度，圧力，エントロピー，体積であるとする．

(1) ギブズ自由エネルギー G の定圧条件における温度についての偏微分

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P$$

を T, P, S, V のうちから必要なものを使って表せ．

(2) この結果を用いて，ギブズ・ヘルムホルツの式

$$\left[\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\Delta G}{T}\right)\right]_P = -\frac{\Delta H}{T^2}$$

を導け．ただし ΔG と ΔH は，それぞれ相変化に伴うギブズ自由エネルギーおよびエンタルピーの変化である．

（問３）揮発性物質 C を溶媒とし少量の不揮発性物質 D を溶質とする理想溶液について以下の設問に答えよ．ここで温度 T における純粋な C の蒸気圧は P°_C であるとし，溶媒 C と溶質 D のモル分率をそれぞれ x_C と x_D とする．気体定数を R として以下の設問に答えよ．

(1) この理想溶液の温度 T における蒸気圧 P_C を，P°_C および x_C を用いて表せ．

(2) 溶媒 C の化学ポテンシャル $\mu_C^{(l)}$ は，純粋な C の化学ポテンシャル $\mu_C^{\circ(l)}$ と溶媒 C のモル分率 x_C を用いてどう表されるか答えよ．

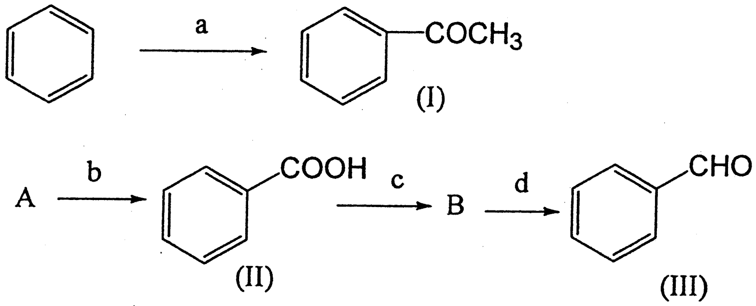
(3) ギブズ・ヘルムホルツの式と（問３）の(2)の答を用いて，沸点上昇 ΔT_b を溶

質Dのモル分率 x_D および純粋なCの沸点 T_b とモル気化熱 Δh_v の関数として求めよ．ただし Δh_v は定数とする．また，$\Delta T_b/T_b$ および x_D は1に比べて十分小さいとする．

（問4）密閉容器に食塩と水を入れて温度圧力を変えた後，平衡状態になったところで食塩の結晶が沈澱しているのが観察された．また，このとき気相は存在しなかった．この状態では系の自由度はいくつか，ギブズの相律を説明しながら答えよ．

第１０問（化学）

（問１）次に示す化学反応式について以下の問に答えよ.



（１）化合物ＡとＢの構造式を示せ.

（２）a,b,c,d について、適切な反応条件（反応試薬など）を示せ.

（３）化合物(I)を還元するための反応条件と還元生成物を示せ.

（４）等モルの化合物(I)と(III)が塩基性条件下で反応する場合の生成物と反応機構を説明せよ.

（５）ある化合物(IV)を適切な条件で処理すると(I)と(III)が等モルで生成する．(IV)の構造式と反応条件を示せ.

（６）化合物(I)，(II)，(III) を化学的に区別する方法を示せ.

（７）化合物(I)，(II)，(III)を分光法を用いて区別する方法を具体的に説明せよ．複数の分光法を用いても構わないが、具体的な同定法に関しても言及すること.

（問２）分子式　$C_4H_{10}O$ で示される化合物のすべての異性体について構造式を示せ．また，不斉炭素が存在する場合には該当する原子を＊で示すこと.

（問３）気相中での次の反応素過程(a) ～(d)を含んだ化学反応について考える．但しk_1～k_4は反応速度定数である.

$$Cl_2 + h\nu \xrightarrow{k_1} 2Cl\cdot \qquad (a)$$

$$Cl\cdot + CH_4 \xrightarrow{k_2} HCl + CH_3\cdot \qquad (b)$$

$$CH_3\cdot + Cl_2 \xrightarrow{k_3} CH_3Cl + Cl\cdot \qquad (c)$$

$$2Cl\cdot \xrightarrow{k_4} Cl_2 \qquad (d)$$

（１）それぞれの素過程はどのように特徴付けられるか、簡単に説明せよ.

（２）全反応が定常的に進行し、CH_4の初期濃度が十分に大きいとする．その場合の$Cl\cdot$と$CH_3\cdot$の濃度$[Cl\cdot]$と$[CH_3\cdot]$に関して成立する条件を示せ.

（３）(2)の条件の下での$[CH_3Cl]$の時間変化を$[Cl_2]$と$[CH_4]$の関数として表せ.

（４）(a) ～(d)以外にも起こりうる反応式の例を二つ示して簡単に説明せよ.

第１１問（化学）

第二周期元素（Li から F）の等核二原子分子の価電子構造に関する以下の設問に答えよ．

（問１） 二原子分子（核間距離; d）の電子状態の固有関数 ψ を，原子軌道の１次結合 (LCAO) 近似で考える．原子１，２の固有状態の波動関数を φ_1, φ_2 とし，$\psi = u_1\varphi_1 + u_2\varphi_2$ とする．固有値 E および係数 u_1, u_2 は次の永年方程式 (1) を解けば求められる．式(1)を解き，固有値（E），固有関数（ψ）を求めよ．導出の手順も示すこと．ただし，ε_α は一原子（量子状態 α）のエネルギー固有値，V (< 0)は共鳴積分値である．

$$\begin{aligned} (\varepsilon_\alpha - E)u_1 + Vu_2 &= 0 \\ Vu_1 + (\varepsilon_\alpha - E)u_2 &= 0 \end{aligned} \qquad (1)$$

（問２） 二原子分子の固有値 E の核間距離（d）依存性は図１のようである．分子軌道のうち π 軌道は分子軸に垂直な 2p 原子軌道を主成分とする状態，σ 軌道は分子軸に平行な 2p 原子軌道あるいは 2s 原子軌道を主成分とする状態である．添え字記号 g, u は二原子の中心に対しての反転における偶奇性をそれぞれ示す．なお，図１のエネルギーの絶対値は元素ごとに異なっている．二原子分子の基底状態の電子配置は，価電子をエネルギーの低い軌道から順に詰めていくことで得られる．リチウムから窒素までは図１の $3\sigma_g$ と $1\pi_u$ が交わる点Ａより d が小さい領域に，酸素およびフッ素はＡより d が大きい領域に対応するものとする．また，縮退軌道（図１中で二重線で示す）内での配置の自由度が存在する時はフントの規則に従うものとする．

（１） 図１に示すように主量子数が同じ σ 軌道（$2\sigma_g$ と $2\sigma_u$ など）では g 状態のエネルギーが低いが，π 軌道では u 状態が低い理由を説明せよ．

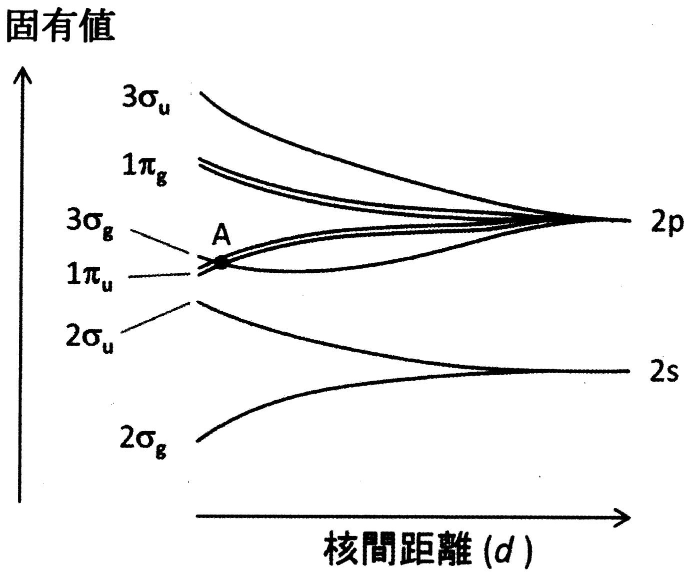
（２） フントの規則とは何か，説明せよ．

（３） N_2 と N_2^+ の基底状態における電子配置を図２の例のように記せ．また N_2 と N_2^+ の結合はどちらが強いか．

（４） O_2 と O_2^+ の基底状態における電子配置を図２の例のように記せ．また O_2 と O_2^+ の結合はどちらが強いか．

（５） O_2 の基底状態におけるスピンは１重項状態か３重項状態か，理由をつけて述べよ．

（６） O_2 に電子を１つ加えた時に核間距離はどうなるか，理由をつけて述べよ．



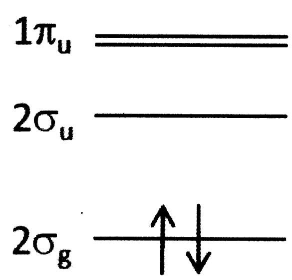


図 2. Li_2分子の電子配置

図 1. 等核二原子分子の固有値 E の

核間距離（d）依存性