

以下の問に答えなさい。ただし リュードベリ定数 $R=13.6 \text{ eV}$, プランク定数 $h=6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$, 電子の質量 $m_e=9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$, 光速 $c=3.00 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ とする。

問 1 . 原子番号 Z の水素様原子のエネルギー準位は、 $E_n = -R \times Z^2 / n^2$ である。

1) $2p$ 状態の水素原子のイオン化エネルギーを eV 単位で求めなさい。

2) 基底状態の He のイオン化エネルギーは 24.6 eV である。原子核の正電荷が他の電子によってどの程度しゃへいされているか求めなさい。

3) H_2 , N_2 , O_2 , F_2 を考える。そのイオン化エネルギーが原子の場合に比べ小さくなる分子を示し、その理由を 30 字程度で説明しなさい。

4) xy 平面に、 $\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{2s} - \phi_{2px})$ および $\varphi_2 = -\frac{1}{2}\phi_{2px} + \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_{2py}$ の概形を、値の正負等も明記して書きなさい。

問 2 . 次の文章中の空欄(A) ~ (P)に適当な語句または式を入れ、文章を完成させなさい。
真空中で金属に光を当てると、表面から電子が飛び出してくる。これを(A)効果という。
この飛び出してくる電子の運動エネルギーの最大値 E_{\max} は、光の波長を、金属の仕事関数を W とすると、次式で表される。 $E_{\max} = (B)$.

電子はポテンシャルエネルギーが一定で、運動の範囲を制約されない限り、そのエネルギーは任意の値を取りうる。ところが、箱の中に閉じ込められると、エネルギーが (C) 化される。これは、箱の中では(D)としての波長に制約が加わるためである。その(D)としての状態は (E) 関数 で表すことができる。ただし、観測可能なのは $| \quad |^2$ 、つまり (F) である。

水素様原子中の電子は、 n, l, m を (C) 数として持つ。1電子の (E) 関数 ψ_{nlm} は軌道に対応する。 $l = 0, 1, 2$ に対して順に、 $s, (G), (H)$ という記号で表す。水素様原子の軌道のエネルギーの順番は、 $1s < (I), (J) < (K), (L), (M) < 4s$ であるが、多電子原子については、 $1s < (I) < (J) < (K) < (L) < \dots$ となる。なお、1つの軌道には同じ(N)の電子を2個以上は収容できない。これを(O)の原理という。

問 3 . ベンゼン分子は6つの自由に動く 電子を持っている。これを2次元の箱 (1辺が a の正方形) の中の粒子として近似する。

1) 1次元の箱の中の粒子のエネルギーは $E_n = \frac{h^2 n^2}{8m_e a^2}$ である。2次元の場合のエネルギー

固有値 E_{n_x, n_y} を量子数 n_x, n_y を用いて表しなさい。またこの場合、HOMO (最高被占軌道) と LUMO (最低空軌道) は、それぞれ何番目の軌道か?

2) ベンゼンの最低エネルギーの光吸収は、 250 nm に観測される。この時に励起する電子の量子数 (n_x, n_y) の変化を示し、またこれから a の大きさを nm 単位で求めなさい。

3) ベンゼンの炭素上の $2s, 2p$ 軌道の混成の種類は何か?