

必要なら次の定数を用いて以下の問いに答えなさい。

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  $m_e = 9.11 \times 10^{-31}\text{kg}$ 、電子の電荷  $e = 1.60 \times 10^{-19}\text{C}$ 、光速  $c = 3.00 \times 10^8\text{ms}^{-1}$

1. 次の文書中の空欄(ア)～(カ)に適当な語句、数値または数式を入れ、文章を完成しなさい。

水素原子の電子は3種類の量子数  $n, l, m$  をもつ。そのエネルギーは、 $E = -R/n^2$  で表現され、主量子数  $n$  だけで定まる。 $n = 1$  では  $l = (\text{ア})$  の1s軌道が1つしかないが、 $n = 2$  では、エネルギー的に(イ)した軌道が全部で(ウ)個ある。基底状態の水素原子に紫外光を当てると電子は遷移するが、その遷移の前後で、 $l$  の値は  $\Delta l = \pm 1$  だけ変化するという選択則が知られている。したがって  $n=2$  の準位への励起スペクトルは、 $l = (\text{エ})$  の状態へ(オ)eVに相当する波長に一重線として観測される。この遷移を強い磁場中で観測すると、一重線が三重線に分裂する。この現象は、磁場中で、基底状態のエネルギーは変化しないが、 $l = (\text{エ})$  の状態は3つの異なる(カ)量子数を持ち、異なるエネルギーになるためである。

2. つぎの事項を大きいものから順に並べ、そのようになる理由を簡単に説明しなさい。(特に断らない限りそれぞれの電子状態は基底状態にあるとする。)

- (1)  $\text{O}_2, \text{N}_2, \text{F}_2$  各分子の結合次数の大きさ
- (2)  $\text{C}, \text{N}, \text{O}, \text{F}, \text{Ne}$  各原子のイオン化エネルギーの大きさ
- (3)  $\text{H}(1\text{s 状態}), \text{H}(2\text{s 状態}), \text{H}_2$  のイオン化エネルギーの大きさ
- (4) アセチレン, エチレン, エタン, ベンゼンのC-C結合距離の大きさ
- (5)  $1\text{eV}, 1\text{m}^{-1}, 1\text{J}$  のエネルギーの大きさ

3. 1,3-ブタジエン(Aとする)と1,3-ブタジイン( $\text{CHCCCH}$ : 別名ジアセチレン Bとする)の2つの分子について、以下の設問に答えなさい。

- (1) A, Bそれぞれの分子中の炭素原子の混成の種類を答えなさい。
- (2) A, Bそれぞれの分子中の電子の総数を答えなさい。
- (3) これらの分子は、いずれも電子が分子中を1次元的に自由に動くことができる共役電子系である。一次元井戸型模型を仮定してAの最低光吸収エネルギーを、Aの長さ  $L_A$ 、電子の質量  $m_e$ 、プランク定数  $h$  を用いて表しなさい。またこの吸収波長は  $217\text{nm}$  に観測される。 $L_A$  の値を求めなさい。
- (4) 分子Bの長さ  $L_B$  は、幾何的に考えると  $L_A$  の1.15倍である。またこの最低光吸収エネルギーは  $4.22\text{eV}$  に観測される。この励起を(3)と同様に一次元井戸型模型で考えるとき、HOMOとLUMOに対応する軌道の量子数はそれぞれいくらか?