

慶應義塾大学 理工学部 2008 年度 春学期 化学 A 期末試験問題 (試験時間 50 分)

【必要なら次の定数を用いなさい。】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  $c = 3.00 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$

**問 1** つぎの (ア) ~ (シ) に適切な語句、数値、記号を入れなさい。

- (1) 水素原子の波動関数は、3つの量子数  $n, \ell, m$  をもち、 $n = 3$  ではエネルギーは (ア) 重に縮重している。また、水素原子中の電子の角運動量ベクトルの大きさは  $\sqrt{\ell(\ell+1)} (h/2\pi)$  で、その  $z$  軸方向の成分は  $m (h/2\pi)$  となり、量子化されている。 $\ell = 1$  の状態で角運動量ベクトルが  $z$  軸となす角度をすべて列挙すると (イ) になる。
- (2) 2 個以上の電子を含む多電子原子では、特定の電子が感じる原子核による引力は、他の電子によって (ウ) され、その程度は軌道の形に依存する。その結果、(エ) 量子数についての縮重が解ける。
- (3) シュテルンとゲルラッハの行った実験では、原子ビームを不均一な磁場の中を通過させてその飛跡を観測した。例えば、ヘリウム原子は不均一な磁場の影響を全く受けないが、リチウム原子のビームを通すと飛跡は、(オ) 本に分かれる。これは、電子に (カ) があり、第 4 の量子数として (カ) 量子数が存在するためである。
- (4) 原子番号が 3 から 12 の元素のうちで、基底状態において不対電子の数が最も多い原子は、(キ) であり、その電子配置は以下の例 1 にならって示すと (ク) となる。  
(例 1)  $\text{He} : (1s)^2$
- (5) 原子番号が 3 から 12 の元素の等核 2 原子分子  $M_2$  のうちで、基底状態で不対電子をもつ分子  $M_2$  は、(ケ) と (コ) であり、原子番号の小さいほうの分子  $M_2$  の電子配置は以下の例 2 にならって示すと (サ) となる。これらの分子  $M_2$  は (シ) に引き寄せられる性質をもつ。  
(例 2)  $\text{He}_2 : (\sigma_g 1s)^2 (\sigma_u^* 1s)^2$

**問 2** 水素原子のエネルギー、1s 軌道の波動関数は、それぞれ

$$\text{エネルギー } E_n = -\frac{R}{n^2}, \quad 1s \text{ 軌道の波動関数 } \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{1}{a_0} r \right)$$

と与えられる。原子核の正電荷  $+Z$  の水素様原子について次の問いに答えなさい。

- (1) 1s 軌道の波動関数に使われている  $a_0$  は、何か答えなさい。
- (2) 水素様原子の具体例を、アルファベット  $N$  で始まる元素記号の原子について、水素様原子として表記して、原子番号の小さい順に 2 つ挙げなさい。
- (3) 水素原子に比べて、水素様原子ではポテンシャルエネルギーは  $Z$  倍になり、かつ、動径  $r$  に関する広がりには  $1/Z$  になることを考慮して、水素様原子のエネルギー準位  $E_n$  を書き表しなさい。
- (4) 基底状態の  $\text{Li}$  原子の第 3 イオン化エネルギーを、 $\text{J}$  単位で求めなさい。
- (5) 水素様原子の 1s 軌道の波動関数を書きなさい。
- (6) (5) で求めた水素様原子の 1s 軌道の波動関数を用いて、水素様原子 1s 軌道の動径分布関数  $D(r)$  の最大値とそれを与える  $r$  の両方を、 $a_0, Z$  を用いて答えなさい。ただし、波動関数  $\Psi(r, \theta, \phi)$  の動径分布関数は、以下のように表される。

$$\text{動径分布関数 } D(r) = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi$$

**問 3** ブタジエン分子について以下の問いに答えなさい。

- (1) ブタジエン分子中の炭素原子の混成の種類を、すべて答えなさい。
- (2) ブタジエン分子中の電子を 1 次元の箱の中の粒子と考えるとき、LUMO の量子数を答えなさい。
- (3) 1 次元の箱のモデルを仮定してブタジエン分子の電子の励起を考える。最も低い励起状態の生成に必要なエネルギーを  $E_0$  とするとき、次に高い励起状態の生成に必要なエネルギーを  $E_0$  を用いて表しなさい。