

以下の問に全て答えなさい。

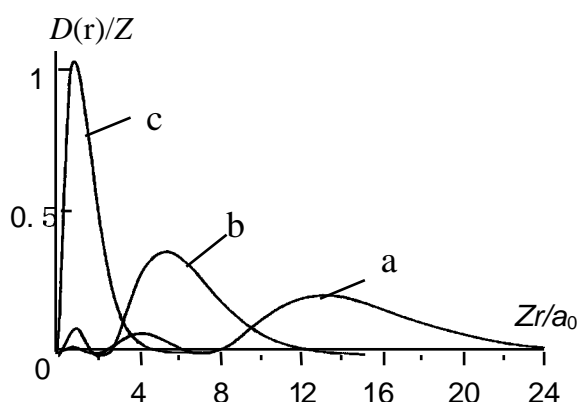
問1

(1) $1s$, $2s$, $2p$ のそれぞれの原子軌道について、主量子数 n 、副量子数 l 、磁気量子数 m の可能な値を全て記しなさい。

(2) 右図は $1s$, $2s$, $3s$ 軌道の動径分布関数である。a, b, c がどの軌道のものか記しなさい。

(3) 基底状態の O^{7+} において、電子の動径分布が最も高い r を nm 単位で求めなさい。

ただし $1a_0$ は 0.0529 nm とする。



問2

(1) O_2 分子のとり最も安定な電子配置を例にならって書き表しなさい。

例 $Be_2 : (\sigma_g 1s)^2 (\sigma_u^* 1s)^2 (\sigma_g 2s)^2 (\sigma_u^* 2s)^2$

(2) O_2 分子は常磁性で、磁場に引き寄せられる性質をもつ。原子番号 12 までの中性の等核 2 原子分子のうちで、 O_2 以外に常磁性の分子があれば、元素記号で答えなさい。なければ、「なし」と答えること。

(3) O_2 , O_2^+ , O_2^- の 3 種の分子のなかで、結合距離の最も短いもの、最も長いもの、それぞれを答えなさい。

問3 次の(ア)～(シ)に、適当な語句、または記号、数値を入れて文章を完成させなさい。

C原子の基底状態における電子配置は(ア)で、その中のp電子は(イ)の規則にしたがい、平行なスピンを持っている。エチレン、エタン、アセチレンのC原子は、いずれも混成軌道を含み、それぞれの混成の種類は(ウ)(エ)(オ)である。また、この3つの分子のなかで、ダイヤモンド中の炭素原子と同じ混成を持つものは(カ)である。

O原子は基底状態で、 $2p_x$, $2p_y$ に一個ずつ価電子を持ち二つのH原子と結合すると、 90° に折れまがった H_2O 分子をつくるはずである。実際の H_2O の結合角は 104.5° である。結合角から H_2O 中の O 原子は、ほぼ(キ)混成であると見なすことができ、2個の電子を収容して、Hと結合していない原子価軌道は(ク)個あり、これらの電子は(ケ)と呼ばれる。O-H結合には電荷の片寄りがあり、ある程度のイオン結合性を持つため、水分子は $1.82D$ の(コ)を持っている。

エチレンの π 電子を1次元の箱の中の粒子と見なし、この箱の長さを 1.34 \AA とする。このとき、HOMO に対応する軌道の量子数 n は (サ)である。また、HOMO から LUMO へ光励起するときの吸収波長は(シ)(nm)となる。ここで必要なら、電子の質量 $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$, プランク定数 $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$, 光速 $c = 3.0 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ を用いること。